

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ,
МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ**

**ТЕРНОПІЛЬСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ІВАНА ПУЛЮЯ**

УКРАЇНСЬКЕ ФІЗИЧНЕ ТОВАРИСТВО

**ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ НАН
УКРАЇНИ**

**НАУКОВИЙ ПАРК „ІННОВАЦІЙНО-ІНВЕСТИЦІЙНИЙ
КЛАСТЕР ТЕРНОПІЛЛЯ”**

**ТЕРНОПІЛЬСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ВОЛОДИМИРА ГНАТЮКА**

НАУКОВЕ ТОВАРИСТВО ІМ. ШЕВЧЕНКА

МАТЕРІАЛИ

ВСЕУКРАЇНСЬКОЇ НАУКОВОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

**“Актуальні проблеми теоретичної,
експериментальної та прикладної фізики”**

АПТЕПФ 2012

м. Тернопіль,

20-22 вересня 2012 року

Матеріали всеукраїнської наукової конференції “Актуальні проблеми теоретичної, експериментальної та прикладної фізики” (м. Тернопіль, 20-22 вересня 2012 року) – Тернопіль: ТНТУ, 2012 – 201 с.

У цьому виданні представлені роботи українських науковців в галузі фізики конденсованого стану, фізики металів, напівпровідників, наносистем, які доповідалися та обговорювалися під час всеукраїнської наукової конференції “Актуальні проблеми теоретичної, експериментальної та прикладної фізики”, проведеної у Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя 20-22 вересня 2012 р.

Матеріали конференції розміщено у інституційному репозитарії ТНТУ імені Івана Пулюя <http://elartu.tstu.edu.ua>

© Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, 2012р.

Програмний комітет

Мриглод І.М.	співголова програмного комітету, академік НАН України, директор ІФКС НАН України (м.Львів);
Литовченко В.Г.	співголова програмного комітету, член-кореспондент НАН України, президент Українського фізичного товариства (м.Київ);
Дідух Л.Д.	заступник голови програмного комітету, професор кафедри фізики ТНТУ (м. Тернопіль);
Головко Л.Ф.	професор НТУУ КПІ (м. Київ);
Дідора Т.Д.	завідувач кафедри фізики і методики її викладання ТНПУ ім. В.Гнатюка (м. Тернопіль);
Котлярчук Б.К.	координатор Львівського регіонального відділення УНТЦ (м.Львів);
Кускова Н.І.	професор Національного університету кораблебудування ім. адмірала Макарова (м. Миколаїв);
Нищенко М.М.	завідувач відділу інституту металофізики НАН України (м.Київ);
Стасюк І.В.	член-кореспондент НАН України, завідувач відділу ІФКС НАН України (м.Львів);
Шендеровський В.А.	провідний науковий співробітник Інституту фізики НАН країни (м. Київ);
Фреїк Д.М.	директор Фізико-хімічного інституту Прикарпатського національного університету ім. Василя Стефаника (м. Івано-Франківськ);
Янушкевич В.А.	генеральний директор ЗАО «Конверсія» (м. Москва).

Організаційний комітет конференції

Рогатинський Р.М. (м. Тернопіль)	<u>Голова організаційного комітету</u>
Химич Г.П. (м. Тернопіль)	<u>Заступник голови оргкомітету</u>
Ковалюк Б.П. (м. Тернопіль)	<u>Заступник голови оргкомітету</u>
Скоренький Ю.Л. (м. Тернопіль)	<u>Вчений секретар конференції</u>

Члени оргкомітету

Нікіфоров Ю.М. (м. Тернопіль),
Кравченко В.М. (м. Київ),
Крамар О.І. (м. Тернопіль),
Никируй Л.І. (м. Івано-Франківськ),
Лісний Б.М. (м. Львів),
Дрогобицький Ю.В. (м. Тернопіль),
Дубик С.О. (м. Тернопіль).

УДК 621.315.592

Дмитро Фреїк, Володимир Чобанюк

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

НАПІВПРОВІДНИКОВІ НАНОСТРУКТУРИ І ПРОБЛЕМИ ТЕРМОЕЛЕКТРИКИ

В останні роки виник новий напрям покращення термоелектричних характеристик матеріалів, в якому було досягнуто прогресу і який дав новий імпульс відповідним дослідженням у цій області. Даний підхід полягає у використанні просторово-неоднорідних структур із включеннями, розміри яких порівняльні з характерними довжинами хвиль електронів і фононів, тобто знаходяться у нанометровій області. Зменшення розмірів системи до нанометрового масштабу викликає різкі відмінності в густині електронних станів, що створює нові можливості для варіації S , σ і k квазінезалежно. Складові нанометрового розміру спричиняють квантово-розмірний ефект (КРЕ), який підвищує коефіцієнт потужності $S^2\sigma$, а компонування внутрішніх границь в наноструктурі дозволяє зменшити теплопровідність в порівнянні з електропровідністю, що базується на відмінностях між фононою і електронною довжинами розсіювання. На цій основі створюють системи з квантовими ямами, дротами, точками та різноманітні композити з невпорядкованими включеннями нанометрового розміру[1,2]. При цьому слід виділити наступні дві стратегії:

1. Використання квантово-розмірних явищ для підвищення коефіцієнту Зеєбека S та для контролю S і електропровідності σ як в деякій мірі незалежних параметрів;

2. Введення багатьох меж, що розсіюють фонони більш ефективно ніж електрони, а також розсіюють переважно ті фонони, які мають найбільший вклад у теплопровідність.

Названі дві стратегії ґрунтуються на трьох концепціях:

- "carrier-pocket" інженерія;
- дроселювання носіїв струму за енергіями;
- перехід напівметал-напівпровідник (НМНП-перехід).

Концепція технології "carrier-pocket" була введена для квантового обмеження носія одного типу в області квантової ями і носія іншого типу – в області бар'єру.

Енергетичне дроселювання носіїв полягає у введенні відповідних меж у вигляді границь, які обмежують енергію носіїв, що входять в матеріал. На межі носії з середньою енергією істотно вищою за рівень Фермі E_F будуть переважно проходити через неї, тим самим підвищуючи термо-е.р.с., яка залежить від надлишку їх енергії ($E-E_F$).

Перехід від напівметалу до напівпровідника характерний для нанодротів Ві. При зменшенні розміру напівметалічного нанодроту, коли енергетичні зони

розщеплюються на окремі підзони, край найнижчої підзони провідності рухається вгору по енергії в той час як край найвищої валентної підзони рухається вниз. За цих умов у матеріалі має місце перехід від напівметалу до напівпровідника із забороненою зоною.

У роботі представлено аналіз нових підходів для покращення термоелектричних параметрів наноструктур. Визначено оптимальні параметри надграток квантових точок, дротів, ям, а також нанокомпозитних матеріалів для досягнення максимального значення термоелектричної добротності ZT . Так, зокрема, у випадку надграток квантових ям в якості об'єктів використовують досить багато сполук та їх комбінацій в гетероструктурах [3]. Крім того, експериментальні дані для товщинних залежностей термоелектричних параметрів у наноструктурах на основі сполук IV-VI демонструють немонотонний осциляційний характер з деяким періодом коливань, що дає можливість визначити енергетичну характеристику структури - енергію Фермі та судити про вплив квантово-розмірних ефектів на електронну підсистему наноструктур [4].

В 2010 р. у теоретичних роботах В. Фоміна і П. Кратзера було виявлено високу чутливість коефіцієнта ZT до значення енергії Фермі i , відповідно, концентрації носіїв у СКТ InAs/GaAs. Так, при певних значеннях енергії Фермі величина ZT СКТ InAs/GaAs практично рівна нулю, а при інших, досить близьких до попередніх, значеннях TE добротність досягає значення $ZT = 3$

На базі експериментальних даних для термоелектричних властивостей квантово-розмірних структур можна стверджувати, що у таких системах має місце різке зниження граткової теплопровідності, а також ріст коефіцієнта Зеєбека. При цьому згідно з теоретичними передбаченнями для випадку нанодротів термоелектрична добротність досягає значення $ZT = 8.1$.

Для розуміння шляхів покращення термоелектричної добротності основна задача на сьогодні полягає у розробці теоретичних моделей впливу квантово-розмірних ефектів на електронну і фононну підсистему наноструктур. Необхідною умовою досягнення бажаної термоелектричної добротності є розробка технології отримання наноструктур із заданим середнім розміром часток, розподілом їх за розмірами та густиною, які повинні підтримуватись як на етапі створення і обробки, так і протягом часу експлуатації.

1. J.H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors. An introduction* (Cambridge university press, 1998). – 451 p.
2. M.S. Dresselhaus, G. Ghen, M.I. Rang, R. Yang, H. Lee, D. Wang, Z. Ren, J-P. Fleurial, P. Gogna, *Adv. Mater.* **19**, 1043 (2007).
3. A. Casian, I. Sur, H. Scherrer, Z. Dashevsky, *Phys. Rev. B* **61**, 15965 (2000).
4. D.M. Freik, I.K. Yurchyshyn, V.M. Chobaniuk, R.I. Nykyruy, Yu.V. Lysiuk, *Sensor Electronics and Microsystem Technologies* **1**, 41 (2011).

УДК 621.315.592:54-165

Ярослав Салій, Любов Межиловська

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

ПІДСИСТЕМА ДЕФЕКТІВ У ТОНКОПЛІВКОВИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СТРУКТУРАХ

Дефекти атомної кристалічної структури суттєво впливають на фізичні властивості власних і легованих напівпровідників [1, 2]. Актуальними є фундаментальні дослідження кінетики формування підсистеми атомних дефектів з метою створення нових плівкових функціональних матеріалів при епітаксійному вирощуванні, легуванні, радіаційному і термічному впливах.

Комп'ютерне моделювання класичних і квантових систем відкрило широкі можливості вивчення фізики і хімії поверхні твердого тіла і плівкового матеріалу. Узгодження результатів моделювання з перших принципів із даними експерименту може забезпечити глибоке розуміння фізичних процесів у досліджуваних об'єктах. Важливим моментом є побудова моделей, що змогли б пояснити процеси і явища, що спостерігаються, оперуючи кінетикою дефектів, їх здатностями мігрувати, поглинатись та рекомбінувати, змінюючи при цьому концентрацію і рухливість вільних носіїв заряду.

Точкові дефекти – вакансії і міжвузлові атоми – досить рухливі при кімнатній і нижчих температурах, утворюючи комплекси з донорними і акцепторними домішками часто змінюють їх тип. Дефекти у напівпровідниках у більшості випадків характеризуються сильною деформацією кристалічної ґратки, малим радіусом хвильової функції локалізованого носія порядку сталої ґратки і відсутністю насичення хімічного зв'язку поблизу дефекту [1, 2].

У роботі представлено і на основі квазіхімічних реакцій рівноваги пояснено експериментальні залежності технологічних процесів напилення і легування, з використанням кінетичних рівнянь пояснено результати радіаційного опромінення і термічного відпалу. Методом молекулярної динаміки показано необхідність використання іонної взаємодії для модельного формування структури типу кам'яної солі і потенціалу Ленарда – Джонса для моделювання властивостей кристалів IV-VI. Дослідження впливу розмірного ефекту на електрофізичні і структурні параметри виконувались з використанням моделі розподілених параметрів і методу кліткових автоматів.

1. Е.И. Рогачова, И.М. Кривулькин, Физика и техника полупроводников **36**, 1040 (2002).
2. Д.М. Заячук, В.А. Шендеровський, Укр. фіз. журн. **36**, 1692-1713 (1991).

УДК 539.12-164, 539.3

Роман Пелещак, Олег Кузик, Олеся Даньків

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
м. Дрогобич, Україна*

РОЛЬ ЕЛЕКТРОН-ДЕФОРМАЦІЙНИХ ЕФЕКТІВ У ФОРМУВАННІ АКУСТОЕЛЕКТРОННИХ, АКУСТООПТИЧНИХ ТА БАРИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ КВАНТОВО-РОЗМІРНИХ СИСТЕМ

Дослідження електрон-деформаційних ефектів у квантово-розмірних структурах є одним з актуальних напрямків сучасної фізики конденсованого стану [1,2]. Це впливає як з необхідності поглиблення розуміння особливостей протікання електронних процесів у реальних напівпровідникових структурах, так і розробки рекомендацій для оптимізації робочих характеристик сучасних приладів електронної техніки: гетеролазерів, світлодіодів, різноваріантних детекторів, тощо.

Завдання теоретичних досліджень при цьому полягає у встановленні взаємозв'язку між електронною підсистемою і деформацією ґратки та у самоузгодженому описі електрон-деформаційних ефектів.

Не дивлячись на значні досягнення в цій області, є цілий ряд задач щодо взаємовпливу електронної і деформовано-ґраткової підсистем у квантово-розмірних структурах, які або не вивчалися зовсім, або розв'язувалися тільки для деяких спеціальних випадків. До числа нерозв'язаних задач слід віднести: встановлення ролі електрон-деформаційного механізму у формуванні електронно-діркових переходів у напівпровідниках із самоорганізованими нанокластерами точкових дефектів та квантовими точками, дослідження впливу електрон-деформаційних ефектів на властивості контакту Шотткі та спектральні характеристики напружених гетероструктур.

Відомо, що оптичні та електричні властивості напівпровідникових приладів на основі квантових ям значною мірою залежать від деформації ґратки і просторового розподілу точкових дефектів. Такі дефекти можуть проникати ззовні або виникати в процесі росту. Взаємодія точкових дефектів із самоузгодженим полем деформації, яке може виникати як за рахунок наявності цих дефектів, так і неоднорідності кристалічної системи (наприклад, гетеромежа) чи під дією зовнішніх факторів (наприклад, акустична хвиля), призводить до просторового перерозподілу дефектів і, при певних умовах, до утворення самоорганізованих дефектно-деформаційних структур (кластерів та періодичних структур). Неоднорідна деформація, зумовлена наявністю кластерів дефектів у гетероструктурах, внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку призводить до локальної зміни ширини забороненої зони і, відповідно, до зміни потенціальної енергії носіїв струму та формування електронно-діркових переходів в околі кластера.

В даній роботі встановлено закономірності перебудови локалізованих електронних рівнів у тришарових гетеросистемах GaAs/InAs/GaAs під впливом

деформації, спричиненої наявністю кластера точкових дефектів у квантовій ямі та створеної акустичною хвилею.

Показано, що залежність різниці енергій електрона ΔE в першому збудженому та основному станах у гетероструктурі GaAs/InAs/GaAs з нанокластером у квантовій ямі InAs від середньої концентрації дефектів N_{d0} має немонотонний характер з максимумом в околі точки $N_{d0} \approx 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Наявність кластера дефектів виду центрів розтягу призводить до збільшення величини ΔE на 80% при $N_{d0} \approx 10^{19} \text{ см}^{-3}$, що повинно відобразитись на ВАХ резонансно-тунельних діодів у зменшенні мінімального значення сили струму.

Ефект зміни різниці енергій електрона в першому збудженому та основному станах суттєво залежить від ефективної маси електрона. А саме, збільшення величини ΔE суттєво проявляється тільки при малих значеннях ефективної маси електрона в матеріалі нанокластера. У випадку, коли ефективна маса електрона в матеріалі нанокластера є більшою від ефективної маси електрона в матеріалі основної ями (InAs), збільшення ΔE є незначним, а при $N_{d0} > 1,5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ різниця енергій електрона в першому збудженому та основному станах є меншою від відповідного значення для даної структури без кластера дефектів. Цей ефект пояснюється тим, що в досліджуваній структурі зміна енергії електрона визначається двома факторами: зміною потенціальної енергії електрона, спричиненою деформаційними ефектами за рахунок наявності кластера, та зміною кінетичної енергії за рахунок відмінності ефективних мас. Якщо ефективна маса електрона в матеріалі нанокластера є меншою від відповідного значення в основній ямі, то обидва фактори є причиною збільшення величини ΔE . У протилежному випадку ці фактори є конкуруючими, а саме, збільшення ефективної маси є причиною зменшення різниці енергій електрона ΔE в першому збудженому та основному станах.

Напівпровідникові гетероструктури з нанокластерами мають високий квантовий вихід фотолюмінесценції і є перспективним матеріалом для створення гетеролазерів у близькій інфрачервоній області спектру [3]. Джерела інфрачервоного випромінювання, які швидко змінюють свою частоту та напрям випромінювання, є важливим елементом оптичних систем зв'язку. Оскільки нанокластери є чутливими до деформації, то акустична хвиля, взаємодіючи з електронною підсистемою, повинна спричинити перебудову електронних та діркових рівнів, що дасть змогу керувати довжиною хвилі випромінювання гетеролазера у заданому діапазоні, який залежатиме від частоти акустичної хвилі, розмірів, поверхневої густини та форми нанокластерів. Змінюючи розміри, поверхневу густину, форму кластера та частоту акустичної хвилі, можна прогнозовано змінювати профіль показника заломлення оптичного резонатора у напрямку, перпендикулярному до напрямку випромінювання. Завдяки цьому можна керувати напрямом поширення випромінювання гетеролазера з КТ, швидко змінюючи його з часом, та здійснювати просторовий перерозподіл світлового потоку, зокрема, збільшувати його інтенсивність у заданих точках простору.

У роботі побудовано теоретичну модель процесу частотної модуляції випромінювання при рекомбінаційному переході між основними станами електрона та дірки в гетероструктурі InAs/GaAs з нанокластерами InAs за допомогою ультразвукової хвилі. Встановлено, що залежність амплітуди частотної модуляції від частоти акустичної хвилі має немонотонний характер з двома максимумами, положення яких визначається геометричними розмірами гетероструктури та пружними сталими її матеріалу. Показано, що із зменшенням розміру нанокластера від 9 нм до 3 нм амплітуда частотної модуляції зростає від 100 ГГц до 300 ГГц, що пояснюється збільшенням деформації матеріалу нанокластера. Також зменшення розміру нанокластера призводить до зміщення максимумів амплітуди частотної модуляції в сторону більших частот, що пояснюється збільшенням частоти власних коливань сферичного нановключення.

У роботі розвинуто метод розрахунку баричного коефіцієнта матеріалу напруженої квантової точки та встановлено закономірності впливу електрон-деформаційних ефектів на баричний коефіцієнт матеріалу квантової точки InAs/GaAs.

Досліджено, що в діапазоні зміни гідростатичного тиску $P = (0 \div 15)$ кбар спостерігається практично рівномірний зсув ліній люмінесценції в бік більших енергій, характер якого не змінюється якісно при збільшенні розмірів квантової точки. Зокрема, збільшення зовнішнього гідростатичного тиску в діапазоні $(0 \div 10)$ кбар збільшує енергію основного оптичного переходу в сферичній квантовій точці InAs радіусом $R_0 = 20 \text{ \AA}$ на 97,8 меВ. Встановлено, що величина баричного коефіцієнта матеріалу напруженої квантової точки є меншою від значення баричного коефіцієнта об'ємного кристалу. Зокрема, величина баричного коефіцієнта матеріалу напруженої сферичної квантової точки радіусом $R_0 = 25 \text{ \AA}$ становить 9,46 меВ/кбар і є меншою від значення баричного коефіцієнта об'ємного кристалу InAs ($K_\infty = 12 \text{ меВ/кбар}$) на 21%, що задовільно узгоджується з експериментом [4].

1. R.M. Peleshchak, I.Ya. Vachynsky, Condensed Matter Phys. **12**, 215 (2009).
2. Р.М. Пелешак, О.В. Кузик, О.О. Даньків, Укр. фіз. журн. **55**, 437 (2010).
3. N.N. Ledentsov, Semicond. Sci. Technol. **26**, 014001 (2011).
4. Б.В. Новиков, Г.Г. Зегря, Р.М. Пелешак, О.О. Даньків, В.А. Гайсин, В.Г. Талалаев, И.В. Штром, Г.Э. Цырлин, ФТП **42**, 1094 (2008).

УДК 537.311.3:536.532(054.3)

Г.Ю. Михайлова¹, М.М. Нищенко¹, А.Г. Дубовой², Г.П. Приходько³

¹*Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины*

²*Институт проблем материаловедения им. И.М. Францевича НАН Украины*

³*Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко НАН Украины*

г. Киев, Украина

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ НАНОКОМПОЗИТА LaNi₅ – УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ

Углеродные нанотрубки (УНТ) имеют ряд уникальных свойств (малые размеры, огромная удельная поверхность, химическая и термическая стабильность, высокая прочность и электропроводность), которые способствуют их эффективному использованию в разных отраслях науки и технологии [1].

Деформация УНТ влияет на ее электронную структуру, в частности, ширину запрещенной зоны и концентрацию носителей заряда [2]. Характерные для нанотрубок высокие отношения длины к диаметру приводят к уникальной анизотропии свойств [3]. и обеспечивают им дополнительные преимущества, которые проявляются в достижении перколяции при концентрациях ниже 5 вес. %. При достижении перколяции удельная электропроводность резко возрастает вследствие образования трёхмерной сетки из нанотрубок – путей электропроводности.

Важным для многих применений есть создание условий при которых свойства композита с нанотрубками, в частности, электропроводность, достигает еще более высоких значений в сравнение с соответствующими свойствами каждого из компонентов отдельно.

В работе было изучено электрические свойства нанокompозита LaNi₅ с УНТ в процессе деформации сжатием и уплотнения, которые приводят к установлению контактов между нанотрубками, увеличению их общей площади и изменению ориентации нанотрубок, а значит и свойств.

Многослойные УНТ, после механического смешивания с частицами LaNi₅, помещались в диэлектрический цилиндр под поршнем.

При незначительном опускании поршня (сжатие) электропроводность $\sigma(\rho)$ скачкообразно возрастает на 6 порядков, что обусловлено созданием электропроводящих путей в нанокompозите в результате перегруппировки и уплотнения массива УНТ и увеличения общей площади контактов между соседними частицами (перколяционный переход).

На рисунке приведена зависимость электропроводности $\sigma(n)$ нанокompозита LaNi_{5+n} вес.% УНТ от концентрации УНТ. Электропроводность исходных компонентов компактированных частиц LaNi₅ диаметром 30 ± 6 мкм составляет $\sigma = 0,7$ (Ом·см)⁻¹, а для компактированного массива УНТ – $\sigma = 1,04$ (Ом·см)⁻¹. С увеличением концентрации УНТ в нанокompозите до 51 вес. % на зависимости $\sigma(n)$ наблюдается острый пик, и электропроводность

достигает значения $\sigma = 10,65 \text{ (Ом}\cdot\text{см)}^{-1}$, что на порядок больше значения σ исходных компонентов.

Острый максимум на кривой может быть обусловлено значительным увеличением концентрации электронов n_e в УНТ, при незначительном изменении их подвижности (для УНТ $n_e = 1,3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и $\mu = 10 \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ [4]). При этой, оптимальной, концентрации наиболее эффективно действует механизм переноса электронов с металлических частиц LaNi_5 к УНТ с увлечением в этот процесс наибольшего количества нанотрубок.

При $n = 56,75$ вес. % УНТ электропроводность нанокompозита падает до $3 \text{ (Ом}\cdot\text{см)}^{-1}$, что связано с уменьшением средней концентрации электронов в УНТ за счет наличия более плотного слоя УНТ вокруг металлических частиц, что способствует снижению электропроводности, так как нарушается оптимальность механизма переноса электронов с металла к УНТ.

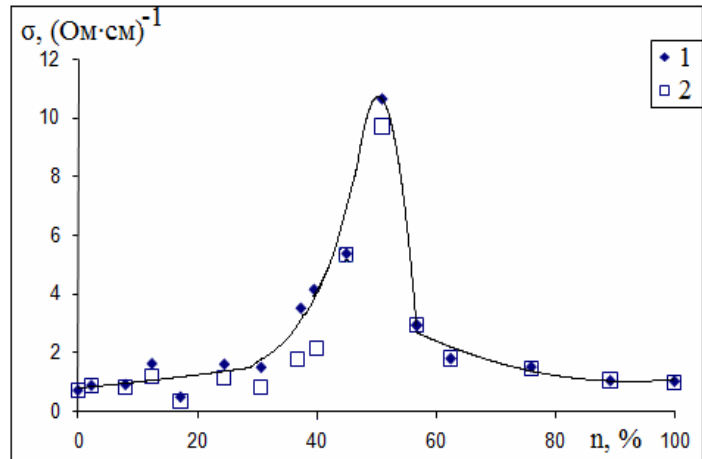


Рисунок 1 - Зависимость электропроводности (σ) нанокompозита LaNi_5 с УНТ от концентрации (n) УНТ. 1 – максимальное значение электропроводности, 2 – электропроводность при максимальном сжатии

1. Э.Р. Бадамшина, М.П. Гафурова, Я.И. Эстрин, *Успехи химии* **79**, 1027 (2010).
2. A. Rochefort, P. Avouris, F. Lesage, D.R. Salagub, *Phys. Rev. B* **60**, 13824 (1999).
3. E.V. Barrera, M.I. Shofner, E.L. Corral, CRC Press. 253 (2005).
4. А.В. Мавринский, В.П. Андрийчук, Е.М. Байтингер, *Известия Челябинского научного центра* **16** (2002).

**И.М. Сидорченко¹, М.М. Нищенко¹, Н.А. Шевченко¹, Г.А. Фролов²,
Л.Л. Сартинская²**

¹*Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины,*

²*Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины,
г. Киев, Украина*

ЭМИССИОННОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГИИ В ЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАНОСТРУКТУРНЫХ КАТОДОВ

Для работы прямого термоэмиссионного преобразователя тепловой энергии в электрическую необходимо два условия: наличие термоэлектронной эмиссии (J) и контактной разности потенциалов (V_k). Термоэлектронную эмиссию на уровне $0,1 - 10 \text{ А/см}^2$ [1], который соответствует эффективному катоду, можно получить с поверхности чистых тугоплавких металлов (W, Mo и др.) только в результате их нагрева до температур свыше $2000 \text{ }^\circ\text{C}$. Работа выхода ϕ этих металлов зависит от грани и от чистоты поверхности, например, для W(110) $\phi \geq 4,7-5,3 \text{ эВ}$, а для Mo (110) $\phi \geq 4,82-5,0 \text{ эВ}$ [2].

Однако, низкотемпературные источники тепла более доступны для использования, чем высокотемпературные, поэтому представляется актуальным рассмотреть вопрос о прямом преобразовании электромагнитной энергии в электрическую эмиссионным способом в температурном диапазоне $300-600 \text{ }^\circ\text{C}$. Такие температуры могут быть легко достигнуты при нагреве материалов концентрированным солнечным излучением. Реализация идеи прямого превращения солнечной энергии в электрическую в указанном диапазоне температур может стать реальностью, если использовать в качестве катодов углеродные нанотрубки (УНТ). Они уже зарекомендовали себя как эффективные автоэлектронные эмиттеры. Определяющим в этом случае является малый радиус ($\sim 1-10 \text{ нм}$) нанотрубок, что позволяет существенно (на 2-3 порядка) снизить напряжение на электродах [3]. Явление автоэлектронной эмиссии, вследствие квантово-механической природы процесса, занимает особое место, так как туннельный механизм выхода электрона из твёрдого тела не требует энергетических затрат, в отличие от термо- и фотоэлектронной эмиссии. Появление дефектов в углеродных нанотрубках изменяет её электронные характеристики, что необходимо учитывать при разработке материалов для катодов в прямых эмиссионных преобразователях концентрированной солнечной энергии в электрическую.

В работе изучены эмиссионные свойства материалов: 1) углеродные нанотрубки, с разной степенью дефектности; 2) спрессованные углеродные нанотрубки с металлическими микрочастицами LaNi_5 ; 3) композиты УНТ с BN и материалами, которые уменьшают работу выхода катода (BaO , Cs, CaO). В качестве анода использовались материалы: Mo и Ni трубки, заполненные композитами УНТ различной дефектности с LaNi_5 и Cs.

Многослойные углеродные нанотрубки диаметром 11 нм и толщиной стенок 3,5 нм с краевыми дислокациями и без них получали методом CVD пиролиза этилена на катализаторах Al-Fe-Mo. Их идентифицировали на электронном микроскопе JEM-100CX11. Катоды получали прессованием массива нанотрубок и композитов на их основе в таблетки диаметром 17 мм и толщиной 2 мм. Анод в виде проволоки Mo, а также Ni трубок с отверстиями, заполненных УНТ разной степени дефектности в сочетании с LaNi₅ и Cs, располагался на расстоянии 1,5 мм от поверхности катода и охлаждался за счёт отвода тепла к корпусу вакуумной камеры с радиатором для его рассеяния. Поток солнечного излучения падал на сферическое зеркало диаметром 1,5 м, от которого он отражался, проходил через кварцевое окно вакуумной камеры (0,1 Па) и фокусировался на поверхности катода в виде пятна диаметром 10 мм. Количественной характеристикой интенсивности солнечной радиации служила температура катода, измеряемая термопарой. Измерялась зависимость эмиссионного тока (в режиме короткого замыкания) и напряжения на электродах (в режиме холостого хода) от температуры катода.

По результатам исследований установлено:

1. Образцы отожженных УНТ и композиты УНТ с LaNi₅, Cs и NB показали значение напряжения на электродах 2-2,5 В. В образце УНТ с дефектами графенового слоя существенно (на порядок) снижается эмиссионный ток.

2. Все многокомпонентные нанокompозиты, содержащие NB и УНТ показали значение тока в режиме короткого замыкания от 10 до более чем 100 мА.

3. Оптимальные результаты получены на образцах УНТ 604А + Cs + LaNi₅: $U=2,5$ В, $I=5$ мА и многокомпонентного композита на основе NB и УНТ: $U=1,5$ В, $I=100$ мА

4. В процессе эксперимента наблюдалось три режима работы преобразователя: 1) происходит нагрев анода, в результате происходит эмиссия электронов с анода на катод (отрицательные значения тока и напряжения $I \sim -1$ мА, $U \sim -1$ В); 2) в этом случае ток достигает 10 мА, а напряжение менее 0,1 В – характерно для эмиссии с катода на анод; 3) наиболее эффективный режим, когда напряжение около 1 В, а потребляемый ток более 0,1 А.

На рис. 1 а изображена экспериментальная кривая, полученная на образце УНТ 99%+NB+Cs+УНТ 604А+BaO с Mo-анодом, соответствующая третьему режиму работы преобразователя. Видно, что ход экспериментальной кривой напоминает участок кривой ВАХ газового разряда рис. 1 б. Различия в показателях тока и напряжения вызваны тем, что механизмы протекания разряда отличаются. В работе [4] разряд возникает в результате приложения высоких напряжений к электродам, а в нашем случае – в результате ионизации пространства между электродами под действием УФ-излучения.

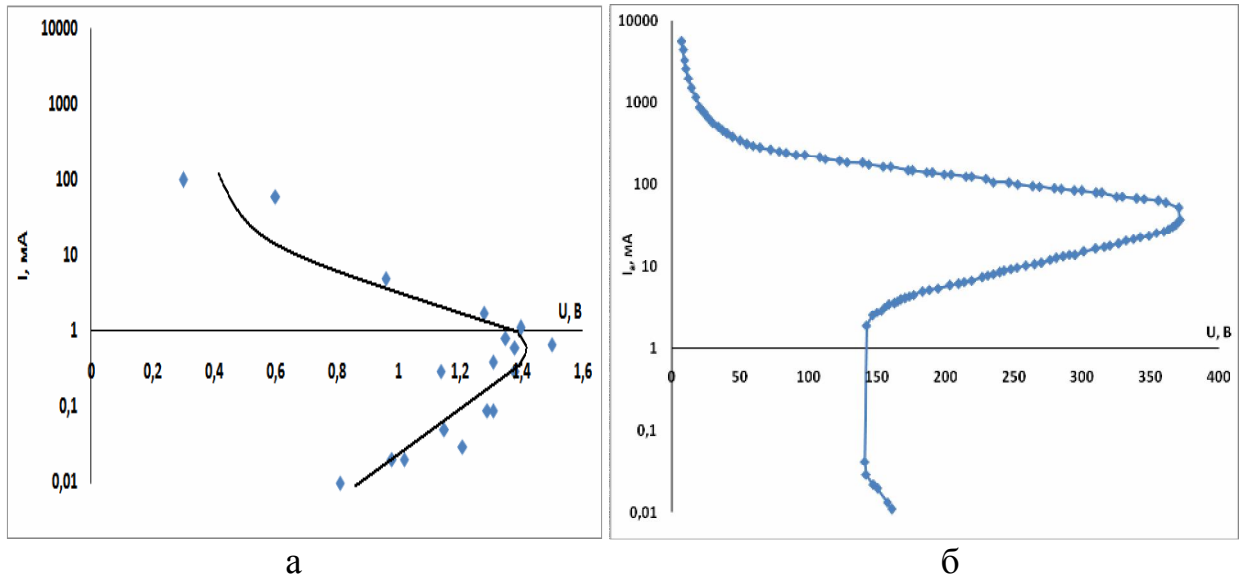


Рисунок 1 - Вольт-амперные характеристики: а). для эмиссии под действием солнечного излучения (экспериментальные данные); б). для газового разряда (литературные данные)[4].

Участок кривой на рис. 1 б, где наблюдается постепенный рост напряжения и тока характеризует аномальный тлеющий разряд, который приводит к ионизации пространства между электродами, при достаточном количестве ионов происходит падение сопротивления газового пространства и разряд переходит в дуговую форму. В нашем случае ионизация происходит под действием УФ-излучения, благодаря наличию в композите щелочного металла Cs, имеющего наименьшие (среди элементов периодической системы) энергию ионизации ($E_{и} = 3,89 \text{ В}$) и работу выхода ($\phi = 1,81 \text{ В}$). Основным фактором, выступающим в пользу использования данных материалов в качестве катодов, является то, что ток 0,1 А достигается при температуре катода менее 300°C .

1. Н.Д. Моргулис, УФН **70**, 679 (1960).
2. Б.П. Вараксин, А.С. Титков, В.И. Силантьев, Н.А. Шевченко, Поверхность **11**, 125 (1991).
3. А.В. Елецкий, УФН **172**, 401 (2002)
4. Е.Т. Кучеренко, *Справочник по физическим основам вакуумной техники* (Вища школа, Киев, 1981), 264 с.

УДК 537.29, 539.122.04

**М.М. Нищенко, М.Я. Шевченко, І.М. Сидорченко, Е.А. Цапко,
Г.Ю. Михайлова**

*Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
м. Київ, Україна*

ФІЗИЧНІ ЯВИЩА І ЕФЕКТИ В БАГАТОШАРОВИХ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБКАХ І МОЖЛИВОСТІ ЇХ ЗАСТОСУВАННЯ

Матеріали в наноструктурному стані володіють комплексом рідкісних властивостей, які не можуть бути одержані в мікро-, а тим паче в макроскопічному стані. Унікальність наноструктур полягає в тому, що їх властивості стають залежними від форми та розмірів: по-перше, за рахунок утворення на їх межах потенційних бар'єрів, які обмежують рух носіїв заряду в одному, двох або трьох напрямках і задають електронним процесам і явищам переважно квантовий характер при домінуючій ролі поверхні розділу і, по-друге, за рахунок нелінійної залежності рівноважної концентрації дефектів від розмірів наноструктур. Квантово-механічні ефекти в нанорозмірних структурах проявляються не тільки квантовим обмеженням, але й інтерференцією, балістичним транспортом (вздовж потенціальних бар'єрів) і тунелюванням (через бар'єри), зокрема резонансним, одноелектронним. Ці фундаментальні фізичні ефекти визначають електричні, оптичні, магнітні та інші властивості наноструктур. Наприклад, ефекти розмірного квантування приводять до суттєвої трансформації електронної структури таких об'єктів, що може спостерігатись вже при кімнатних температурах – неперервний електронний спектр стає дискретним. Внаслідок цього фізичні величини, параметри і характеристики наноструктур, матеріалів і систем на їх основі досягають рекордних значень або мають якісно нові властивості.

Вуглецеві нанотрубки найбільш привабливі з наукової точки зору наноструктурні об'єкти, які мають свої характерні ознаки, унікальні властивості і перспективу широкого застосування. Багато з перспективних напрямків у нанотехнології і наноелектроніці у світі пов'язано сьогодні з нанотрубками, які досліджуються в багатьох наукових центрах. Вуглецеві нанотрубки у десятки разів міцніші за сталь й у 6 разів легші, електричний струм і тепло проводять краще за мідь, біосумісні. Ширина їх забороненої зони змінюється в межах 0-2 eV, в залежності від діаметра, наявності дефектів, тощо.

Методами електронно-позитронної анігіляції в роботі [1] вивчені особливості внутрішньої будови вуглецевих нанотрубок, вплив дефектів на перерозподіл електронної густини і електропровідність. Було показано, що спектр кутового розподілу анігіляційних квантів одношарових напівпровідникових ВНТ являє собою суперпозицію 2-х гаусіан, що свідчить про відсутність вільних електронів, а спектр багатошарових ВНТ, як правило, містить ще й параболічну компоненту, внесок в яку дають позитрони, які анігілюють із вільними електронами, концентрація яких у вуглецевих

нанотрубках, як і в графіті, дуже мала. Встановлено, що дефекти графенового шару, які мають атомний розмір, призводять до розмиття хвильових функцій π -електронів і одночасно до зростання концентрації вільних електронів. В деяких зразках концентрація вільних електронів досягала найбільших значень [2]. Їх дослідження на електронному мікроскопі високого розділення показало наявність крайових дислокацій. Такі дефекти з'являються коли довжина одного з внутрішніх циліндрів менша за довжину багат шарової вуглецевої нанотрубки. На краю такого незавершеного в процесі росту циліндру відбувається обрив ковалентних σ -зв'язків всередині нанотрубки, хвильові функції яких просторово перекриваються з хвильовими функціями розтягнутих в ядрі крайової дислокації (майже удвічі) ван-дер-ваальсових π -зв'язків. Окрім того, в ядрі дислокації існують і області стиснення, в яких знижується висота бар'єру і частина електронів переходить з локалізованого стану в делокалізований. В результаті зростає концентрація квазівільних електронів, які дають внесок в параболічну складову спектру кутового розподілу анігіляційних фотонів і збільшують поперечну електропровідність. Зауважимо, що таку структуру з крайовими дислокаціями не можуть мати одношарові ВНТ. Наведені вище результати вказують на глибокий зв'язок між локальною (в області дислокацій) геометрією багат шарових ВНТ і їх електронною структурою, яка впливає на електричні, термоелектричні і емісійні властивості. Це було підтверджено дослідженнями електропровідності просторово неорієнтованих багат шарових ВНТ, які було розміщено в замкнений об'єм (циліндр під поршнем), в процесі деформації і наступного розвантаження. Встановлено, що в однокомпонентній системі, яка складається із згорнутих багат шарових ВНТ можливий перколяційний перехід діелектрик-метал при стисненні в поперечному напрямку впорядкованого масиву нанотрубок. Було показано, що чим більший внесок дефектів гексагонального шару масиву ВНТ, тим нижчий поріг перколяції. Це обумовлено перегинанням нанотрубок. Тобто ідеально прямі ВНТ мають бути без дефектів. Виявлений при розвантаженні масиву ВНТ обернений перколяційний перехід, положення якого визначається межею пружності нанотрубок. Окрім того, у ВНТ з дислокаціями стає можливим поперечний рух електронів як по зовнішньому шару, так і наскрізь нанотрубки, долаючи такі перешкоди як згорнуті у циліндри графенові шари. Наявність дислокацій у ВНТ, по-перше, збільшує електропровідність, а по-друге, проводить до появи квантових ефектів в електропровідності при зміні геометричних параметрів масиву багат шарових впорядкованих ВНТ при деформації.

Нами встановлено, що наявність дефектів суттєво впливає і на інші властивості БВНТ, зокрема, термоелектричні і емісійні. Так, наприклад, гама-опромінення БВНТ (1,2 еВ), при якому утворюються дефекти атомного розміру в графенових згорнутих шарах призводить до значного зростання коефіцієнту Зеєбека з 30 до 55 мкВ/К при дозі опромінення $7,5 \cdot 10^{16}$ $\gamma/\text{см}^2$. Поява ж дислокацій приводить до зростання концентрації електронів, яких стає більше ніж дірок. В результаті коефіцієнт Зеєбека зменшується приблизно до 20

мкВ/К. Експериментально було встановлено, що емісійний струм з нанотрубок з дислокаціями під дією сонячного і лазерного випромінювання зростає в декілька разів в порівнянні із струмом з вуглецевих нанотрубок без дислокацій.

1. М.М. Нищенко, С.П. Лихторович, Збірник наукових праць: “Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології” **1**, 193 (2003).
2. И.Е. Галстян, А.П. Шпак, М.М. Нищенко, В.В. Трачевский, Е.А. Цапко, А.К. Мельник, *Металлофизика и новейшие технологии* **33**, 1023 (2011).

УДК 621.315.592

Ігор Юрчишин, Олег Надрага

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

КВАНТОВО-РОЗМІРНІ ЕФЕКТИ У НАНОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВІ СПОЛУК IV-VI

Здатність наноструктурованих матеріалів підвищувати термоелектричну (ТЕ) добротність привертає все більшу увагу [1].

Метою даної роботи було теоретичне пояснення особливостей поведінки ряду термоелектричних (ТЕ) параметрів від ширини квантових ям (КЯ) халькогенідів свинцю (PbS, PbSe, PbTe) вирощених на підкладках KCl і покритих захисним шаром EuS.

У моделі КЯ з високими стінками вирази для коефіцієнта Зеебека S та електропровідності σ можна записати як [2]:

$$S = \frac{k_B}{e} \left[\frac{E_F}{k_B T} - \frac{A_1 + A_2}{A_3} \right] \quad (1)$$

$$\sigma = \frac{1}{2\pi d} \frac{2k_B T}{\hbar^2} \sqrt{\frac{m_x^*}{m_y^*}} e^2 \tau_0 A_3 \quad (2)$$

$$A_1 = \left(\sum_{n=1}^{E_n \leq E_F} \int_0^{\infty} x^2 \left(-\frac{\partial f_n}{\partial x} \right) dx \right) \quad (3)$$

$$A_2 = \left(\sum_{n=1}^{E_n \leq E_F} E'_n \int_0^{\infty} x \left(-\frac{\partial f_n}{\partial x} \right) dx \right) \quad (4)$$

$$A_3 = \left(\sum_{n=1}^{E_n \leq E_F} \int_0^{\infty} x \left(-\frac{\partial f_n}{\partial x} \right) dx \right) \quad (5)$$

де f_n - функція розподілу Фермі, $x = \varepsilon / k_B T$ - понижена енергія носія, $\eta_n = \xi - E'_n$. Тут $\xi = E_F / k_B T$ і $E'_n = E_n / (k_B T)$, k_B - стала Больцмана.

У даній моделі розраховано залежності енергії Фермі та ефективної маси від ширини КЯ. На їх основі досліджено характер зміни періоду осциляцій густини станів з ростом ширини ями. На основі співвідношень енергії Фермі та ефективної маси носіїв з шириною ями побудовано d -залежності коефіцієнта Зеебека, електропровідності та коефіцієнта ТЕ потужності (рис. 1).

При використанні даної моделі для опису поведінки ТЕ коефіцієнтів у наноструктурах PbTe, PbSe, PbS при 300 К ширина КЯ у теоретичній моделі вважалася рівною товщині конденсату в експериментальних залежностях відповідних параметрів. Отримані залежності ТЕ коефіцієнтів від ширини КЯ халькогенідів свинцю характеризуються немонотонною осциляційною поведінкою.

Дані обчислення проводились в наближенні сталої концентрації і рухливості носіїв n -типу на всьому діапазоні ширини ями, які підбиралися виходячи з

відповідних експериментальних вимірювань на досліджуваному діапазоні товщин конденсату [3-5]. Залежності ТЕ параметрів від ширини ями для різних сполук з ряду халькогенідів свинцю відрізняються середніми значеннями цих параметрів на всьому досліджуваному діапазоні, а також величиною і положенням точок екстремуму. Для всіх сполук халькогенідів свинцю при малих значеннях ширини ями (менше 20 нм) виявлено аномально високі значення коефіцієнта Зеебека та дуже низькі значення електропровідності. Збільшення ширини ями приводить до зниження величини коефіцієнта Зеебека та до збільшення величини електропровідності. При цьому всі криві виходять на насичення. Зазначимо, що такий хід кривих повністю відповідає експериментальним даними [3-5], що свідчить про правильність зроблених припущень щодо природи немонотонного ходу експериментальних кривих.

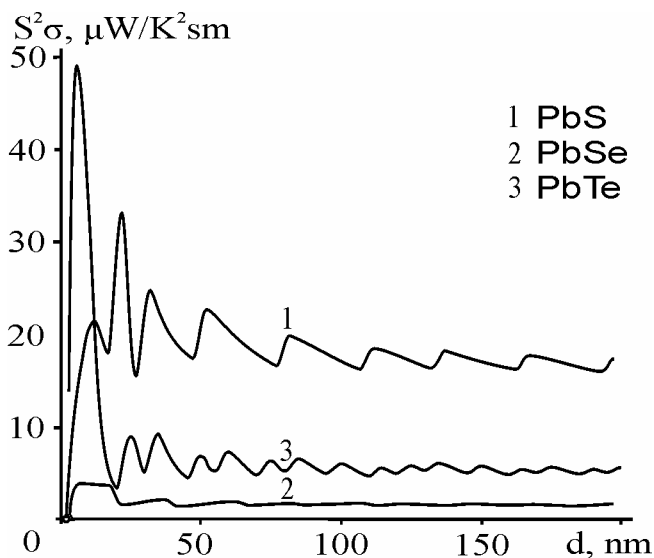


Рисунок 1 - Теоретична залежність коефіцієнта ТЕ потужності $S^2\sigma$ від ширини КЯ PbS, PbSe, PbTe в моделі безмежно глибокої потенціальної ями при $T = 300$ К.

Робота виконана в рамках держбюджетних тем № 0111U001766 МОНМС України, № 0111U004951 ДФФД МОНМС України та № 0110U006281 НАН України.

1. D.M. Freik, Yurchyshyn I.K., Chobaniuk V.M., Nykyrui R.I., Lysiuk Yu.V., *Physical sensors* **8**, 41 (2011).
2. *CRC Handbook of Thermoelectrics*, ed. D.M. Rowe (CRC Press, 1995).
3. E.I. Rogacheva, O.N. Nashchekina, Y.O. Vekhov, M.S. Dresselhaus, S.B. Cronin, *Thin Solid Films* **423**, 115 (2003).
4. E.I. Rogacheva, T.V. Tavrina, O.N. Nashchekina, S.N. Grigorov, K.A. Nasedkin, M.S. Dresselhaus, S.B. Cronin, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 2690 (2002).
5. Rogacheva E.I., Nashchekina O.N., Grigorov S.N., Dresselhaus M.S., Cronin S.B., *Nanotechnology* **14**, 53 (2003).

УДК 621.794.4, 546.48.24

Володимир Прокопів

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
 м. Івано-Франківськ, Україна*

МЕХАНІЗМИ ФОРМУВАННЯ ДЕФЕКТНОЇ ПІДСИСТЕМИ У ПАРОФАЗНИХ КОНДЕНСАТАХ КАДМІЙ ТЕЛУРИДУ

Кадмій телурид, завдяки особливому комплексу фізико-хімічних властивостей є перспективним матеріалом для використання у перетворювачах сонячної енергії, детекторів X- та γ-випромінювання, що функціонують при кімнатних температурах.

Квазіхімічні реакції утворення власних точкових дефектів у тонких плівках кадмій телуриду

№ п/п	Рівняння реакції	Константа рівноваги	K^0 , (см ⁻³ , Па)	ΔН, еВ
I	$CdTe^s = Cd^v + \frac{1}{2}Te_2^v$	$K_{CdTe} = P_{Cd}P_{Te_2}^{1/2}$	$1,2 \cdot 10^{10}$	3,03
II	$Cd^v = Cd_{Cd}^0 + V_{Te}^0$	$K_{Cd,v} = [V_{Te}^0] \cdot P_{Cd}^{-1}$	$6,61 \cdot 10^{25} \cdot T^{-5/2}$	3,24
III	$\frac{1}{2}Te_2 = Te_{Te}^0 + V_{Cd}^0$	$K_{Te_2,v} = [V_{Cd}^0] \cdot P_{Te_2}^{-1/2}$	$1,01 \cdot 10^{39} \cdot T^{-17/4}$	2,67
IV	$V_{Te}^0 = V_{Te}^+ + e^-$	$K_a = [V_{Te}^+] \cdot n / [V_{Te}^0]$	$3,5 \cdot 10^{14} \cdot T^{3/2}$	0,38
IVa	$V_{Te}^0 = V_{Te}^{2+} + 2e^-$	$K'_a = [V_{Te}^{2+}] \cdot n^2 / [V_{Te}^0]$	$3,06 \cdot 10^{28} \cdot T^3$	0,84
V	$V_{Cd}^0 = V_{Cd}^- + h^+$	$K_b = [V_{Cd}^-] \cdot p / [V_{Cd}^0]$	$2,44 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$	0,05
Va	$V_{Cd}^0 = V_{Cd}^{2-} + 2h^+$	$K'_b = [V_{Cd}^{2-}] \cdot p^2 / [V_{Cd}^0]$	$2,14 \cdot 10^{29} \cdot T^3$	0,47
VI	"0" = $e^- + h^-$	$K_i = n \cdot p$	$5 \cdot 10^{39} \cdot T^3$	1,5
VII	$n + [V_{Cd}^-] + 2[V_{Cd}^{2-}] = p + [V_{Te}^+] + 2[V_{Te}^{2+}]$			

Тонкі плівки кадмій телуриду одержували з парової фази методом гарячої стінки [1]. Процес утворення цих дефектів при вирощуванні плівок описується системою рівнянь квазіхімічних реакцій наведених у табл.

Тут $K = K_0 \exp(-\Delta H / kT)$ – константи рівноваги; P_{Cd} , P_{Te_2} – парціальні тиски пари кадмію і телуру відповідно; e^- – електрони; h^+ – дірки; n і p – концентрації електронів і дірок відповідно; „V” – пара.

Реакція (I) описує сублімацію твердого кадмій телуриду із розкладом на компоненти, (II)–(III) – проникнення атомів кадмію та телуру з парової фази у

плівку з утворенням нейтральної металічної V_{Cd}^0 та аніонної V_{Te}^0 вакансій відповідно. (IV)–(V) – реакції йонізації утворених дефектів; (IV) – збудження власної провідності. Слід відмітити, що реакції (II)–(VI) проходять на підкладці і їх константи рівноваги є функціями температури підкладки T_{II} , а реакція (I) відбувається у випарнику і її константа рівноваги є функцією температури випаровування T_B .

Рівняння (VII) – загальна умова електронейтральності.

Рівняння (I)–(VII) дають можливість визначити концентрацію електронів n через константи рівноваги K та парціальний тиск пари кадмію P_{Cd} . Отримуємо рівняння 4-го степеня відносно n :

$$An^4 + Bn^3 - Cn - D = 0$$

$$\text{де: } A = 2 \frac{K'_b \cdot K_{Te_2,V} \cdot K_{CdTe}}{K_i^2 \cdot P_{Cd}}; \quad B = 1 + \frac{K_b \cdot K_{Te_2,V} \cdot K_{CdTe}}{K_i \cdot P_{Cd}}; \quad C = K_i + K_a \cdot K_{Cd,V} \cdot P_{Cd};$$

$$D = 2K'_a \cdot K_{Cd,V} \cdot P_{Cd} = 0.$$

Знаючи концентрацію електронів, користуючись співвідношеннями (I)–(VI), можна знайти холлівську концентрацію вільних носіїв заряду n_H , концентрацію дірок p , одно- та двозарядних вакансій кадмію $[V_{Cd}^-]$, $[V_{Cd}^{2-}]$, та телуру $[V_{Te}^+]$, $[V_{Te}^{2+}]$:

$$n_H = n - K_i / n, \quad p = K_i / n,$$

$$[V_{Cd}^-] = \frac{K_b \cdot K_{Te_2,V} \cdot n}{K_i \cdot P_{Cd}} \quad [V_{Te}^+] = \frac{K_a \cdot K_{Cd,V} \cdot P_{Cd}}{n}$$

$$[V_{Te}^{2+}] = \frac{K'_a \cdot K_{Cd,V} \cdot P_{Cd}}{n} \quad [V_{Cd}^{2-}] = \frac{K'_b \cdot K_{Te_2,V} \cdot K_{CdTe} \cdot n^2}{K_i \cdot P_{Cd}}$$

Ефективні значення перед експоненційних множників K_0 і ентальпій реакцій ΔH для констант реакцій (табл.) взяті ті ж, що і для кристалів [2].

Деякі результати розрахунку залежностей концентрації вільних носіїв заряду від температури підкладки T_{II} і температури випаровування T_B наведено на рис. 1–2.

З графіків видно, що при низьких температурах випаровування T_B і високих підкладки T_{II} одержуємо плівки р-типу провідності. При цьому з підвищенням температури випаровування T_B , при постійній температурі підкладки T_{II} концентрація дірок p зменшується, при деякій температурі T_{II} настає інверсія провідності з р- на n-тип та в подальшому зростає концентрація електронів (рис. 1).

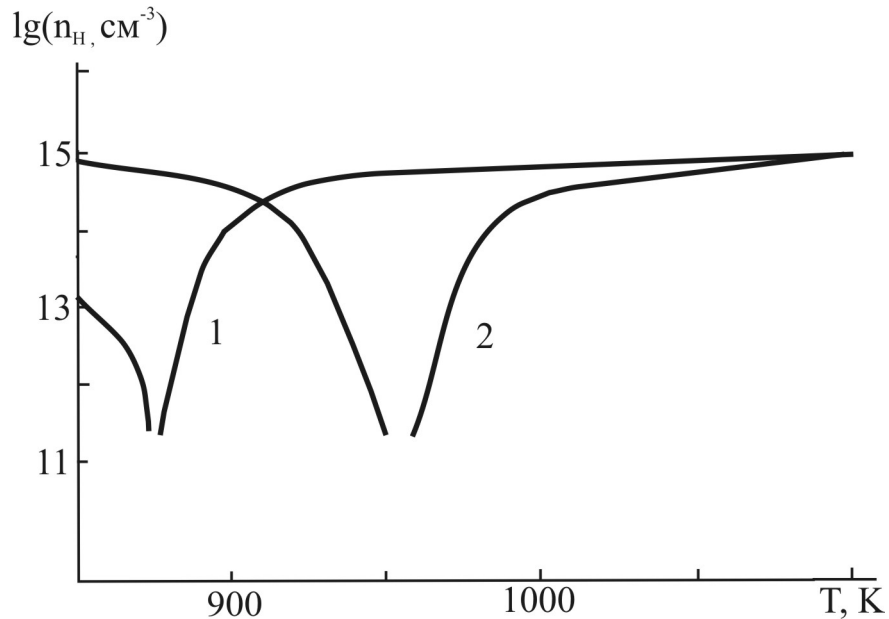


Рисунок 1 - Залежності холлівської концентрації вільних носіїв заряду n_H від температури випаровування T_B при температурі підкладки T_H , К: 1 – 700, 2 – 800.

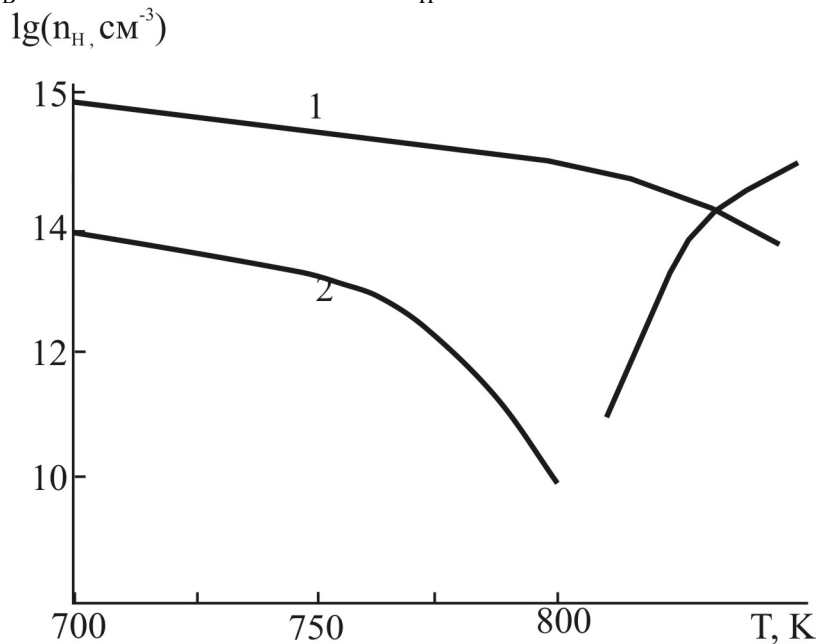


Рисунок 2 - Залежності холлівської концентрації вільних носіїв заряду n_H від температури підкладки T_H при температурі випаровування T_B , К: 1 – 1100, 2 – 850.

При високих температурах випаровування T_B одержуємо плівки тільки n-типу провідності для всієї області зміни температури підкладки T_H . При цьому, зі збільшенням температури підкладки, при постійній температурі випаровування T_B концентрація електронів спадає і якщо $T_B < 900$ К настає інверсія провідності з n- на p-тип (рис. 2).

1. Д.М. Фрейк, М.А. Галушак, Л.И. Межиловская, *Фізика и технология полупроводниковых пленок* (Вища школа, Львов, 1988), 152 с.
2. Д.М. Фрейк, В.В. Прокопів, У.М. Писклинець, *Фізика і хімія твердого тіла* **4**, 547 (2004).

УДК 621.315.592

Богдан Дзундза, Оксана Костюк, Орест Возняк

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

ПОВЕРХНЕВІ ЯВИЩА І МЕХАНІЗМИ РОЗСІЮВАННЯ В ТОНКИХ ПЛІВКАХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СПОЛУК

Для тонких плівок, на відміну від монокристалів, характерними є те, що відношення поверхні до об'єму є значним. Товщина плівок, у ряді випадків, є тим параметром, який визначає транспортні властивості і домінуючі механізми розсіювання носіїв заряду. Ступінь впливу приповерхневих областей на властивості плівок залежить від товщини останніх, структури, рівня легування, температури [1-2].

Досліджено особливості поведінки питомого опору та рухливості носіїв від товщини плівок телуриду свинцю осаджених із парової фази у вакуумі на скляні підкладки. Плівки являли собою полікристалічну структуру з розмірами кристалітів 0,01-0,12 мкм.

За умови переважання розсіювання носіїв струму на поверхні (μ_{Γ}) і межах зерен (μ_z) питомий опір цих областей визначається правилом Маттісена [2]. Якщо концентрація носіїв і ефективна маса є сталими, тоді

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_{\Gamma}} + \frac{1}{\mu_z}. \quad (1)$$

Тут μ – експериментально визначена рухливість. Рухливість носіїв при розсіюванні на границях зерен визначається [1]

$$\mu_z = \frac{2q}{h} D \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{-1/3}, \quad (3)$$

де D – середній розмір зерна, q – заряд носіїв, n – концентрація носіїв, h – стала Планка. Рухливість носіїв струму у випадку дифузного розсіювання на поверхні визначається як [2]:

$$\mu_{\Gamma} = \mu_v (1 + \lambda/d)^{-1}. \quad (4)$$

Тут λ – середня довжина вільного пробігу носіїв, μ_v – рухливість об'ємного матеріалу.

Згідно моделі Тейлера розсіювання носіїв заряду на межах зерен описується часом релаксації τ_0 таким чином, що $l_0 = \tau_0 v$, де l_0 – ефективний середній вільний пробіг носіїв заряду у нескінченно товстій плівці, v – швидкість носіїв. Тоді

$$\rho = \rho_0 \left[1 + \frac{3}{8} \lambda \frac{(1-P)}{d} \right] \quad (5)$$

Тут ρ_0 – питомий опір у нескінченно товстій плівці. Рівняння (1) виражають пряму лінію $y = A \pm Bx$ у координатах $\rho \sim d^{-1}$:

$$\rho = \rho_0 + \frac{3}{8} \rho_0 \lambda (1-P) \frac{1}{d}; \quad (6)$$

$$\text{Тут } A = \rho_0; B = \frac{3}{8} \rho_0 \lambda (1 - P).$$

Із рівняння (1) випливає, що пряма лінія пересікає вісь ординат при $d^{-1} \rightarrow 0$ у точці, що визначає ρ_0 . Тангенс кута нахилу прямої визначає величину в яку входить λ . Якщо розглядати дифузне розсіювання (тобто $P=0$), то можна легко визначити λ і ρ_0 .

Визначивши згідно (6) із експериментальної залежності питомого опору від оберненої товщини довжину вільного пробігу (λ), використавши формулу (4) знаходимо товщинну залежність поверхневої рухливості. Враховуючи правило Маттісена та маючи експериментальну залежність рухливості (рис. 2) з вираз (3) отримуємо залежність величини зерна (D) від товщини плівки (рис. 3). Відзначимо, що для досліджуваних плівок характерним є розмірний ефект у електричному опорі: має місце його зростання із зменшенням товщини (зростання $1/d$). При цьому холлівська рухливість носіїв заряду суттєво зменшується. Так зокрема при зміні товщини плівок від 0,3 мкм до 0,05 мкм рухливість зменшується майже на два порядки. Останнє вказує на те, що міжфазні межі “плівка – підкладка”, “плівка – вільна поверхня” та міжкристалічні межі впливають на явища переносу, які пов’язано із значенням середньої довжини вільного пробігу носіїв заряду. У нашому випадку ефективний середній вільний пробіг складає $\lambda \approx 0,32$ мкм.

Розрахунки вказують, що якщо в області малих товщин (0,05 - 0,15 мкм) переважає розсіювання на поверхні плівок то вже в діапазоні 0,15-0,3 мкм домінує розсіювання на межах зерен. Експериментально спостережуване зростання рухливості рухливості з товщиною плівок пов’язано із збільшенням величини кристалітів в плівках.

Залежність холлівської рухливості плівок від товщини пояснено дифузним механізмом розсіювання носіїв струму на поверхні та впливом міжзеренних меж.

Робота частково виконана у рамках наукових проектів ДФФД України (державні реєстраційні номери 0112U003693) та МОН України (державний реєстраційний номери 0110U006281).

1. *Поверхностные свойства твердых тел*, под ред. М. Грина (Москва, Мир, 1972), 432 с.
2. P.R. Vaya, J. Majht, B.S.V. Gopalam, C. Dattatrepan, Phys. Stat. Sol. (a), **87**, 341 (1985).

УДК 546.48.24, 544.022.384.2

Олександр Соколов, Ігор Ліщинський, Володимир Потяк, Іван Біліна
*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

ПРОЦЕСИ ФОРМУВАННЯ І СТРУКТУРА ПАРОФАЗНИХ КОНДЕНСАТІВ КАДМІЙ ТЕЛУРИДУ

Тонкі плівки телуриду кадмію мають широке використання у напівпровідниковому приладобудуванні: для виготовлення детекторів жорсткого випромінювання, елементів сонячних батарей тощо. В останні роки значна зацікавленість плівками CdTe викликана можливістю створення на їх основі квантових точок для спінових інформаційних систем з характерним часом релаксації 100 пс [1]. На сьогодні існує значна кількість методів одержання тонких плівок і наноструктур CdTe, серед яких особливе місце займає метод гарячої стінки [2]. Однак властивості плівок телуриду кадмію, отриманих відзначеним способом, на цей час досліджені недостатньо, що гальмує процес їх практичного використання.

Плівкові наноструктури CdTe отримували з парової фази методом гарячої стінки. В якості підкладок використовували свіжі сколи (0001) слюди-мусковіт. Температуру випаровування наважки із наперед синтезованої сполуки CdTe змінювали в межах $T_B = (670 - 770)$ К. Температуру осадження підкладки варіювали в межах $T_{II} = (520-620)$ К. Товщина конденсату задавалась часом осадження $t = (0,5-15)$ хв у межах (0,1-20) мкм. Швидкість конденсації пари на підкладку становила $V = (0,02-2)$ мкм/хв. Температура стінки камери T_C підтримувалась на 50 К вище температури випарника T_B .

Після аналізу АСМ-зображень наноструктур телуриду кадмію на сколах (0001) слюди-мусковіт, отриманих методом гарячої стінки при різних технологічних факторах можна стверджувати, що домінуючим механізмом зародження CdTe на слюді слід вважати механізм Фольмера-Вебера, для якого характерним є формування окремих зародків конденсату на поверхні підкладки із наступним їх розростанням і зростанням.

На основі апроксимації залежностей висоти нанокристалітів від температур випаровування T_B та осадження T_{II} активаційними залежностями, визначено її енергетичні характеристики та встановлено домінуючі механізми росту: дифузійного чи електронного, пов'язаного із утворенням хімічного зв'язку.

[1] З.Ф. Томашик, Е.О. Билевич, В.Н. Томашик, Конденсир. среды и межфазн. границы 33, 237-241 (2002).

[2] Д.М. Фрейк, М.А. Галушак, Л.И. Межиловская, *Фізика и технология полупроводниковых пленок* (Вища школа, Львів, 1988), 152 с.

УДК 621.315.529

Ярослав Яворський, Ігор Ліщинський

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

ТОПОЛОГІЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ЗАРОДЖЕННЯ І РОСТУ НАНОСТРУКТУР МЕТАЛІЧНОГО СРІБЛА У НАНОСТРУКТУРАХ Ag|VbTe|-СЛЮДА

Бурхливий розвиток нанотехнологій стимулює дослідження властивостей плівок, товщина яких складає десятки і навіть одиниці нанометрів. Виключно цікавим об'єктом для дослідження виявилися наноструктури срібла, інтерес до яких суттєво зріс останнім часом.

У роботі виконано аналіз результатів дослідження процесів формування, морфології поверхні та топологічних особливостей наноструктур срібла, отриманих різними технологіями.

Показано, що наноструктури Ag на поліамідній підкладці мають кластерну структуру, яка складається з паличкоподібних утворень, що формуються ланцюжками. Виявлено, що розмір кластерів сильно залежить від товщини плівок. Значне збільшення кластерів (від 130 до 250 нм) спостерігається аж до товщини (100-120) нм. При цьому має місце різка залежність провідності плівок від її товщини (ділянка (40-120) нм).

Встановлено, що кристаліти на металічних підкладках характеризуються двома виділеними напрямками, обумовленими різними механізмами росту. Горизонтальні ряди, найбільш ймовірно, орієнтовані по одній з осей кристалічної ґратки підкладки, в той час як діагональні ростуть на нерівностях підкладки, що залишилися після шліфування.

Методами атомно-силової мікроскопії показано, що плівки Ag на свіжих сколах (0001) слюди-мусковіт мають фрактальну структуру, форма і розміри кластерів визначаються умовами осадження – температура випаровування $T_{\text{в}}=(800-900)^{\circ}\text{C}$, температура підкладки (осадження) $T_{\text{п}}=(50-250)^{\circ}\text{C}$, час осадження $t=(5-25)$ хв.

Для наноструктур срібла на слюді при низьких температурах підкладок ($T_{\text{п}}=50^{\circ}\text{C}$) і часі осадження ($t=25$ хв.) показано, що має місце ріст чітко сформованих октаедричних нанокристалів, орієнтованих площинами (112) паралельно до (0001) слюди-мусковіт у напрямі [111] нормально до поверхні підкладки. Розміри кластерів при $T_{\text{п}}=500^{\circ}\text{C}$, $T_{\text{в}}=800^{\circ}\text{C}$ і $t=25$ хв складають (80 – 100 нм) у латеральному і (5-15) нм у вертикальному напрямках.

Отриманий результат АСМ-зображень морфології поверхні та топологічні особливості наноструктур срібла на свіжих сколах (0001) слюди-мусковіт дає можливість стверджувати про реалізацію зародження за механізмом Фольмера-Вебера, для якого характерно формування на початкових етапах осадження окремих зародків, які у процесі осадження пари розростаються із орієнтаційним впливом монокристалічної підкладки.

УДК 621.315.592

Дмитро Фреїк, Василь Бачук, Ярослав Салій, Алла Лисак
*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

ПРОЦЕСИ ОСВАЛЬДІВСЬКОГО ДОЗРІВАННЯ У НАНОСТРУКТУРАХ ПЛЮМБУМ ТЕЛУРИДУ, ВИРОЩЕНИХ ІЗ ПАРОВОЇ ФАЗИ

Плюмбум телурид відноситься до вузькощілинних напівпровідників із двосторонньою областю гомогенності, тому є перспективним матеріалом для створення на його основі активних елементів, що функціонують в інфрачервоній області оптичного спектру і вже давно та інтенсивно вивчається. Крім того, велика величина відношення електропровідності до ґраткової теплопровідності у плюмбум телуриді робить його ефективним термоелектричним матеріалом для середньої області температур. Зараз відкриваються нові можливості їх застосування у зв'язку із інтенсивним розвитком тонко плівкової технології та нанотехнологій.

Зауважимо, що одним із ефективним способом створення дискретних наноструктур є вакуумна конденсація на поверхню твердого тіла. Дослідження механізмів росту, процесів формування рельєфу, структури та електричних властивостей плівки, осадженої парофазними методами, надзвичайно важливі для подальшого розвитку технологій напівпровідникових епітаксіальних структур, що застосовуються в мікро- і наноелектроніці.

Часто еволюцію нанокструктур на поверхні підкладки аналізують виходячи з розподілу латеральних і нормальних розмірів нанооб'єктів. Однак виокремлення кластера в оточенні сусідів з метою вимірювання його розмірів є надзвичайно складним завданням. Видається простішим розглядати еволюцію розподілу висот всієї системи кластерів, що визначають статистичні закономірності.

АСМ зображення поверхонь плівок PbTe різної товщини, вирощених нами на сколах (0001) слюди – мусковіт за температур осадження $T_p=(350 - 630)$ К демонструє наявність великої кількості правильних тригональних пірамід різної висоти, що перекриваються. У залежності від температури і часу осадження спостерігаються зміни концентрації пірамід так їх висот.

Гістограми розподілу висот наноструктур PbTe, отриманих за даними АСМ-досліджень при різних часах та температурах осадження, вказують на те, що при збільшенні часу осадження зростає ймовірність формування великих за розмірами наноострівців. Так, зокрема, при збільшенні часу осадження від 3 хв. до 10 хв. висота наноструктур зростає від 178 нм до 436 нм.

Визначити механізми росту наноутворень в освальдівському представленні ми пропонуємо, використовуючи апроксимацію розподілу за висотами гаусіанами. Через асиметричність гістограм розподілу наночастинок за висотою, їх було реконструйовано суперпозицією функцій Гауса:

$$y = A_1 \exp^{-0,5\left(\frac{x-x_1}{w_1}\right)^2} + A_2 \exp^{-0,5\left(\frac{x-x_2}{w_2}\right)^2} + A_3 \exp^{-0,5\left(\frac{x-x_3}{w_3}\right)^2}, \quad (1)$$

де x_i – положення максимумів за розмірами; w_i – півширини і A_i – амплітуди розподілів. Тут перша гаусіана із параметрами A_1 , x_1 , w_1 є основною, фоною у гістограмах розподілу висот і відображає загальні тенденції у формуванні наноструктур, то друга – характеризує ріст найбільш ймовірних за розмірами структур. Що стосується третьої гаусіани, то вона є відповідальною за найбільші за висотою трьохвимірні утворення (таблиця 1).

Таблиця 1 - Значення відношень h_{max}/x_i та h_{max}/\bar{x} для гаусіан розподілу висот у наноструктурах PbTe/(0001) слюда-мусковіт.

№ зразка	$\frac{h_{max}}{x_1}$	$\frac{h_{max}}{x_2}$	$\frac{h_{max}}{x_3}$	$\frac{h_{max}}{\bar{x}}$
37-38	1,8	1,4	4	2,0
35-36	1,9	1,9	1,4	1,7
32-33	3,4	3,6	2,4	3,0
30-31	1,5	2,3	2	1,9
41-42	1,9	1,5	1,5	1,6
39-40	2	1,5	2,8	2,0
2-3	1,9	1,4	3,4	1,9
30-31	1,5	2,3	2	1,9
43-44	1,3	1,3	1,9	1,5

Згідно даних (таблиця 1) відношення величин максимальних висот (h_{max}) до найбільш ймовірних (x_1 , x_2 , x_3) та середньої (\bar{x}), що визначається гаусіанами (1) перевищує розраховане теоретично за умови реалізації тільки дифузійного механізму росту наноструктур (таблиця 1). Останнє може відповідати тому факту, що при вибраних технологічних умовах (час осадження, температура підкладки) домінуючим механізмом росту наноструктур PbTe на сколах (0001) слюда-мусковіт є електронний вагнерівський. Особливо він яскраво виражений при формуванні найбільших за розмірами наноструктур, відповідальними за яких є третя гаусіана (1).

Це не стосується високих температур осадження (зразок № 43-44, таблиця 1) для якого $h_{max}/\bar{x} = 1,5$ (таблиця 1). У цьому випадку атоми мають значну кінетичну енергію поверхневої міграції, що і зумовлює зростання ймовірності дифузійних матричних процесів.

Відносно наноструктур PbTe/(111) BaF₂, то спостережувані зміни у розмірах наноструктур від температури T_n і часу осадження τ та температури випаровування T_v , то їх також можна обґрунтувати процесами оствальдівського дозрівання.

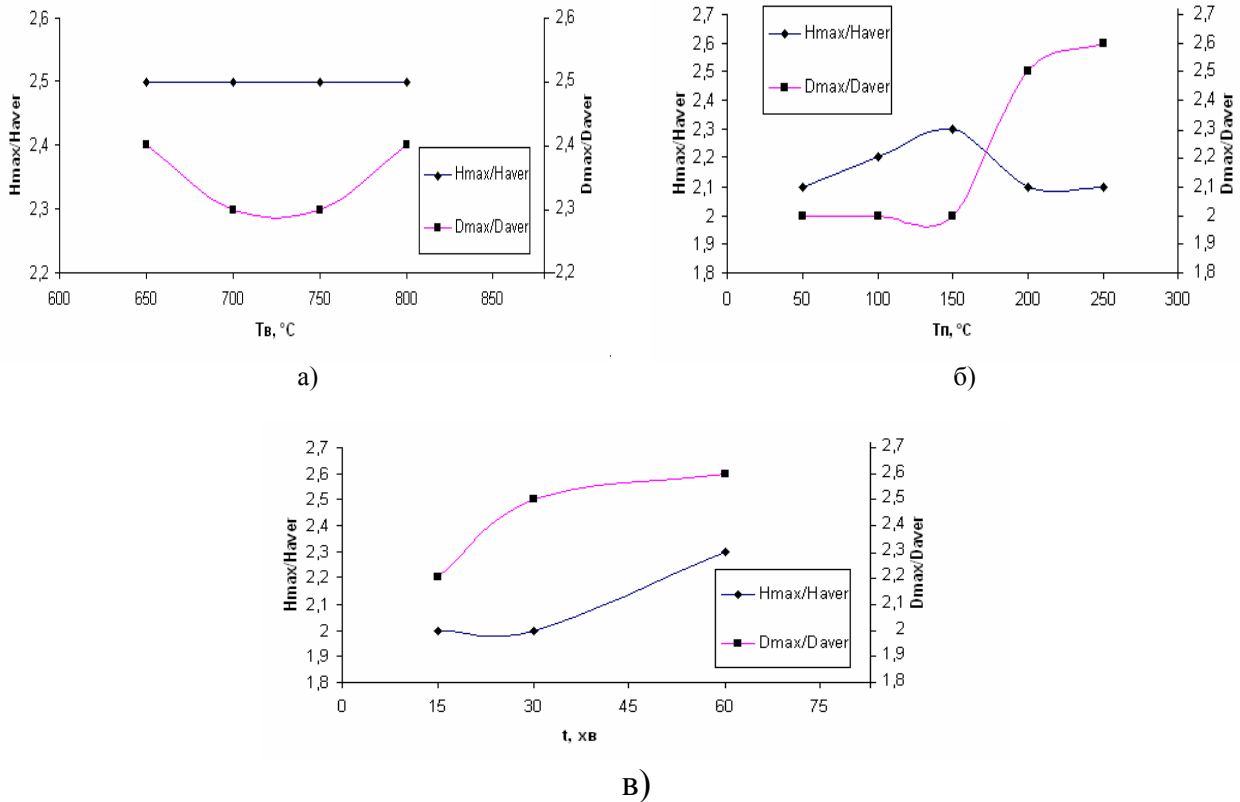


Рисунок 1 - Залежність відношень максимальних до середніх значень висот (H_{max}/H_{aver}) і діаметрів (D_{max}/D_{aver}) нанокристалів PbTe на (111) BaF₂ від температури випаровування T_v (а), температури підкладки T_p (б), та часу осадження τ (в) при сталих – а: $T_p=50^\circ\text{C}$, $\tau = 30$ хв; б: $T_v=700^\circ\text{C}$, $\tau = 60$ хв; в: $T_v=700^\circ\text{C}$, $T_p=200^\circ\text{C}$.

Проведені розрахунки залежності відношення максимальних значень висоти (H_{max}) і діаметра (D_{max}) до їх середніх значень (H_{aver} , D_{aver}) H_{max}/H_{aver} ; D_{max}/D_{aver} відповідно від температури T_p (рисунок - б) та часу (рисунок - в) осадження вказують, що вони знаходяться в інтервалі від 2 до 2.5. При цьому із підвищенням температури T_p і часу τ осадження має місце тенденція до їх зростання (рисунок - б,в). Порівнюючи отримані результати із даними теорії, слід віддати перевагу електронним процесам, пов'язаних із швидкістю утворення хімічних зв'язків. Особливо такий характер оствальдівського дозрівання чітко проявляється при підвищенні температури T_p (рисунок - б) та часу осадження (рисунок - в) за яких спостерігається значний ріст окремих нанокристалів.

УДК 621.315.529

Ярослав Яворський, Ростислав Яворський

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

КОНСТРУКТИВНІ ОСОБЛИВОСТІ ВАКУУМНИХ МІКРОПІЧОК ДЛЯ ОСАДЖЕННЯ ТОНКИХ ПЛІВОК І НАНОСТРУКТУР

Тонкі напівпровідникові плівки та наноструктури мають широкий спектр використання як ефективні активні елементи у джерелах і детекторах електромагнітного випромінювання у різних діапазонах довжин хвиль, фільтрах і відбиваючих покриттях, тощо. У роботі запропоновано удосконалені раніше розроблені конструкції вакуумних нагрівачів, які дають можливість отримувати серії парофазних конденсатів у єдиному циклі за різних технологічних факторів: різної товщини $h=(0,1-5)$ мкм при сталій температурі осадження $T_n=(300-570)$ К; однакової товщини h при різних T_n у відзначених вище межах.

З метою реалізації першого завдання – отримання конденсату однакової товщини при заданій температурі осадження – вакуумний нагрівник складається з п'яти мікропічок (рис. 1а,б), виготовлених з брусків вакуумної міді розміром $40*20*8$ мм³. У корпусі мідних брусків 1 просвердлені отвори під керамічні трубки 2, які служать електричним ізолятором між корпусом і нагрівальним елементом 3. Знизу корпус має площадку з тримачами 4 для матеріалу підкладки 6. Для зменшення теплових втрат поверхнею підкладок і надання потрібної конфігурації конденсату встановлені екрани 5 з танталу товщиною 0,3 мм. Усі мікропічки градуювалися під однакову температуру шляхом підбору опору ніхромової дротинки діаметром 0,3 мм. Температури пічок вимірюються термопарами ”хромель-копель”, поміщених у їх корпус поблизу підкладок. Система мікропічок прикріплена діагонально до поворотного кронштейна, нагрівальні елементи з'єднані паралельно (рис. 2).

Отримання парофазних напівпровідникових конденсатів здійснюють таким чином (рис. 2). Випарник 7 завантажують наважкою із досліджуваної речовини (наприклад порошок із синтезованої сполуки плюмбум телуриду), Наперед заготовлені підкладки 4 (наприклад свіжі сколи слюди) закладають у пічки 1. При перекритій заслінці 5 нагрівають до заданої температури мікропічки 1 з підкладками 4 та випарник із наважкою. Підводять одну із пічок під отвір 6 у заслінці над випарником і здійснюють осадження пари на підкладку протягом певного фіксованого часу. Потім перекривають заслінкою потік пари із випарника, підводять поворотом наступну із секційних мікропічок з підкладкою, відкривають заслінку і проводять осадження із іншим часом.

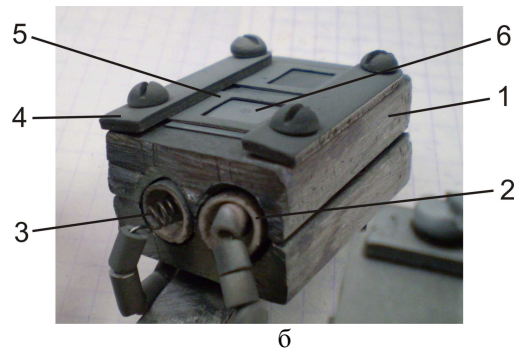
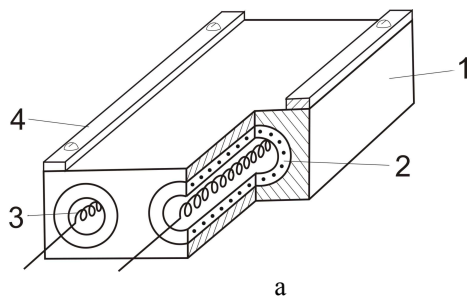


Рисунок 1 - Конструктивна схема (а) і світлина вакуумної мікропічки: 1 – корпус, 2 – керамічна трубка, 3 – спіраль нагрівника, 4 – тримачі підкладок.

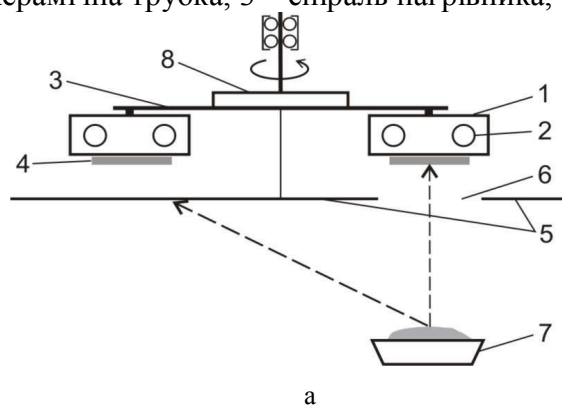


Рисунок 2 - Конструктивна схема пристрою для отримання плівок і наноструктур

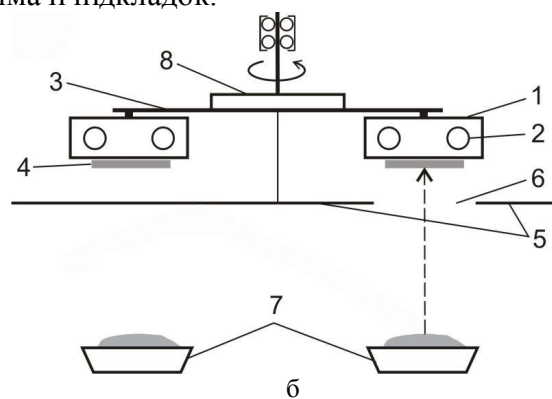


Рисунок 3 - Конструктивна схема пристрою для отримання двошарових парофазних тонкоплівкових наноструктур.

Описаний процес повторюють п'ять разів для кожної мікропічки із підкладками. Для реалізації другого завдання – отримання конденсату однакової товщини при різних температурах осадження – пристрій (рис. 3) містить наступні конструктивні елементи: систему мікропічок (1) із нагрівниками (2) які розміщені по колу за допомогою радіальних кронштейнів (3); підкладки (4) для осадження пари; рухому заслінку (5) із асиметрично розміщеним отвором (6); механічну систему для повороту мікропічок (8) та два випарники (7) із наважками різних речовин. Задані температури пічок встановлюються опором ніхромових нагрівачів за рахунок зміни їх довжини.

Отримання наноструктур здійснюють таким чином: випарники 7 (рис. 3) завантажують наважками різних сполук (наприклад перший випарник порошком плюмбум телуриду, а другий сріблом). Підготовлені підкладки 4 (наприклад пластинки скла) закладають у пічки 1. При перекритій заслінці 5 нагрівають до заданих температур мікропічки з підкладками та перший випарник з наважкою. Підводять одну з пічок під отвір 6 у заслінці над першим випарником і здійснюють осадження пари матеріалу на підкладку протягом певного фіксованого часу. Потім перекривають заслінкою 5 потік пари з випарника, підводять поворотом наступну із секційних мікропічок з підкладкою, відкривають заслінку і проводять осадження на іншу підкладку при цьому ж часі осадження. Процес повторюють п'ять разів для кожної мікропічки з підкладками, після чого перекривають заслінку і перший випарник

виключають. Крім того, запропонований пристрій дозволяє отримання двошарових тонкоплівкових структур.

Запропоновані пристрої осадження пари у відкритому вакуумі доступні у реалізації і піддаються автоматизації. Їх можна ефективно використовувати для розв’язання різних задач тонкоплівкового матеріалознавства у вакуумних постах типу ВУП-5К та інших вакуумних установках.

УДК 669.621.315.592:54–165

Михайло Лоп’янок, Ростислав Никируй

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

ОПТИМІЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ ВИРОЩУВАННЯ ТОНКОПЛІВКОВИХ СТРУКТУР ZnS МЕТОДОМ ГАЗОДИНАМІЧНОГО ПОТОКУ ПАРИ

Халькогеніди металів 2-ї та 4-ї групи Періодичної таблиці хімічних елементів зарекомендували себе чудовими матеріалами для практичного використання в сучасних пристроях електроніки та термоелектрики. Зокрема напівпровідникові сполуки ZnS розповсюджені в якості люмінофорів, сонячних елементів а також як матеріал для напівпровідникових лазерів, а також в термоелектриці [1-3]. Спосіб та умови отримання матеріалу є основним чинником, що впливає на його властивості та подальше використання. Для отримання нових матеріалів з потрібними властивостями необхідно вдосконалювати вже відомі та розробляти нові методи отримання напівпровідникових матеріалів. Метод газодинамічного потоку пари дозволяє отримати тонкі плівки та нанокристаліти з добре прогнозованими властивостями. Широкі межі керування процесом дають можливість отримувати різні за властивостями матеріали з однотипного технологічного процесу.

В даній роботі досліджено основні параметри процесу осадження ZnS із газодинамічного потоку пари. Встановлено залежність параметрів осадженого матеріалу від технологічних умов та проведено їх оптимізацію для отримання наноструктур та плівок. Описано можливості ефективного підбору технологічних параметрів для отримання матеріалів із прогнозованими властивостями.

Використовуючи методику обчислення параметрів газодинамічного потоку пари, визначено профілі термодинамічних параметрів пари (довжини ділянки конденсуючої підкладки $x_{кр}$, коефіцієнта конденсації α , швидкості результуючої конденсації ω^* , ступеня пересичення парової фази $\ln\psi$) від безрозмірної координати ξ , температури випаровування T_v і градієнта температури dT/dx , а також від їх комплексної дії [4]. Отримані залежності дають можливість встановити важливі висновки для отримання матеріалів прогнозованої структури.

Зростання значень коефіцієнта конденсації α та наближення їх до одиниці вказує на переважання процесів конденсації над ревіпаровуванням часток матеріалу з поверхонь стінок в області високих значень ξ (рис. 1). Цей процес також ілюструє, що при $\xi \approx 0,6$ крива швидкості конденсації зазнає зламу. Залежність розрахованих значень результуючої швидкості конденсації ω^* від безрозмірної координати ξ вказує на те, що при $\xi \approx 0,35$ (що відповідає максимуму ω^*) отримуємо плівки найбільшої товщини. Оцінка процесу ревіпаровування матеріалу дає можливість вказати область з більш структурно

досконалим матеріалом знаходиться до максимуму результуючої швидкості конденсації. Подальше зменшення відносної густини ρ/ρ_1 та зростання ступеня пересичення парової фази із зростанням ξ можна пояснити тим, що за наявності у камері витратної дії (конденсації) тиск пари по мірі віддалення його від поверхні випаровування зменшується, що призводить до зростання довжини вільного пробігу молекул.

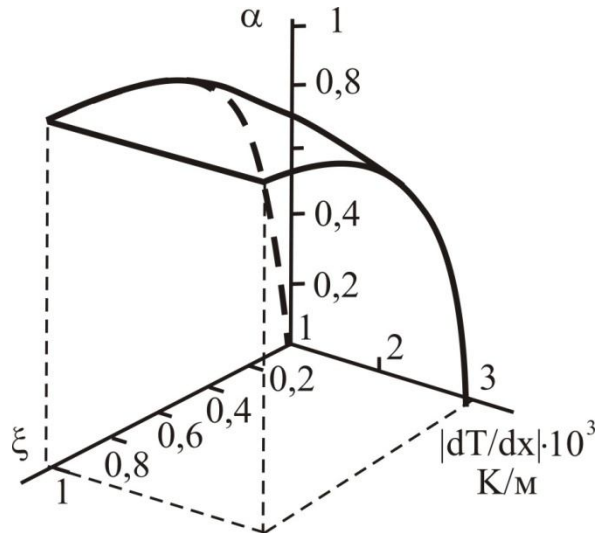


Рисунок 1 - Залежність розрахованих значень коефіцієнта конденсації α від градієнта температури $\frac{dT_c}{dx}$ та безрозмірної координати ξ (при фіксованих технологічних режимах: $T_s = 923$ К, $L = 0,08$ м, $d = 0,05$ м).

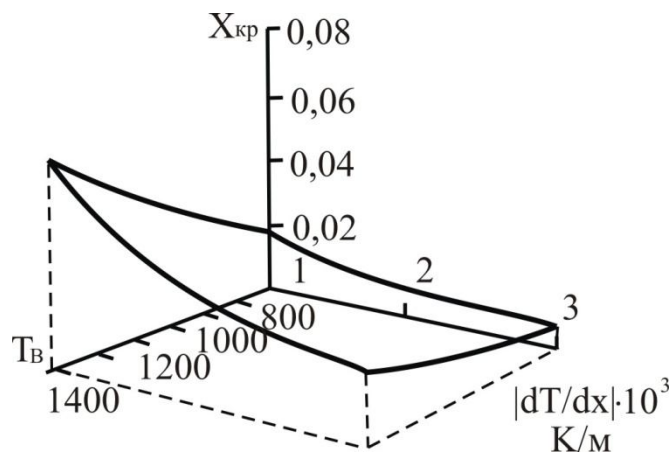


Рисунок 2 - Залежність розрахованих значень критичного перерізу $x_{кр}$ від температури випарування T_s , градієнта температури $\frac{dT_c}{dx}$ (при фіксованих технологічних режимах: $L = 0,08$ м, $d = 0,05$ м).

Довжина ділянки підкладки, на якій відсутній шар конденсату $x_{кр}$ зростає із збільшенням температури випаровування T_v та зменшенням градієнта температури (рис. 2). Причому, більш різкому зростанню $x_{кр}$ сприяє насамперед зменшення градієнта $\frac{dT_c}{dx}$, ніж зростання температури T_v . Також залежність

параметрів пари ZnS від температурних факторів вказує, що при постійному градієнті температури вздовж стінок камери ступінь пересичення зростає із зменшенням T_B . Коефіцієнт конденсації α , навпаки, зростає при збільшенні температури випаровування T_B . Зменшення dT/dx діє на параметри подібно збільшенню T_B (рис. 1). Довжина ділянки підкладки, на якій відсутній шар конденсату $x_{кр}$ зростає із збільшенням температури випаровування T_B та зменшенням градієнта температури.

Варіювання геометричними параметрами камери (довжиною L , діаметром d) дає змогу отримати зміну параметрів осадження без зміни температурних факторів. Збільшення діаметра камери d , і зменшення її довжини L призводять до більш плавної зміни ступеня пересичення пари та обумовлює більш різке збільшення результуючої швидкості конденсації. Також спостерігається зменшення ω^* при зменшенні довжини камери L .

Оптимальні фізико-технічним умовам росту плівок, яким відповідають максимальні значення $\omega^*(\xi)$ і низькі значення ступеня пересичення ψ , які на пряму пов'язані із густиною потоку пари. В наших умовах найбільш якісні плівки ZnS можна отримати при розміщенні підкладки конденсації в значенні безрозмірної координати $\xi = 0,15$ та $x = 0,02$ м.

1. C. Ricolleau, L. Audinet, M. Gandais, T. Gacoin, J.P. Boilot, *Journal of Crystal Growth* **203**, 486 (1999).
2. Р.А. Андриевский, *Рос.хим.ж.* **XLVI (5)**, 50 (2002).
3. W.T. Tsang, in: *Semiconductors and Semimetals*, Eds. R.K. Willardson, A.C. Beer (Academic Press, New York, 1990), p. 24.
4. Ю.З. Бубнов, М.С. Лурье, Ф.Г. Старос, Г.А. Филаретов, *Вакуумное нанесение пленок в квазизамкнутом объеме* (Ленинград, 1975).

УДК 539.2

Мар’ян Галушак¹, Андрій Ткачук^{1,2}, Олександр Криницький^{1,2}

¹Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу,

²Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника
м. Івано-Франківськ, Україна

МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ ТОНКОПЛІВКОВИХ КОНДЕНСАТІВ

Щоб оцінити стан тонкоплівкових конденсатів, потрібно виміряти їх термоелектричні параметри: теплопровідність, електропровідність, коефіцієнт термо-е.р.с. Тому доцільно описати основні методи вимірювання термоелектричних параметрів тонкоплівкових матеріалів.

Вимірювання теплопровідності тонких плівок важливе як для конструювання елементів мікроелектронних схем, плівкових приймачів випромінювання і т. д., так і для досліджування фізичних особливостей плівкового стану. Ці вимірювання ускладнені тим, що у зв’язку з малою площею поперечного перерізу зразків, температурне поле в них порушене неконтрольованим відводом тепла дротинами термопар або термометрів опорів, які використовуються для вимірювання температури.

Опишемо особливості визначення теплопровідності тонких плівок.

Перший за все розглянемо абсолютний метод вимірювання теплопровідності [1]. На вимірюваний зразок, який являє собою непровідну плівку, наноситься допоміжний шар S-подібної форми металу чи напівпровідника (рис. 1). При пропусканні через полосу l струму I відбувається її нагрів, який залежить від підведеної електричної потужності і теплового потоку, який поширюється від полоски l до ізотермічних електродів 4.

Використання S-подібної форми допоміжного шару виключає шунтування теплового потоку у вимірюваній плівці цим шаром. Відносно невелика втрата тепла через перемички 2 враховується поправочним членом у формулі для визначення теплопровідності.

Вимірювання проводяться в ізотермічній камері вакуумованого кріостата. Тут же проводиться наплення досліджуваних металічних і напівпровідникових плівок у вакуумі 10^{-7} Па.

Для визначення коефіцієнта теплопровідності провідного шару, потрібного для обчислення поправки на краєві ефекти, використовувалась запропонована методика. Наплення плівок в тій же камері, що і проводиться вимірювання, підвищує точність вимірювання за рахунок збереження умов, в яких проводилось дослідження властивостей підкладки, крім того, зменшується імовірність забруднення підкладки.

Коефіцієнт теплопровідності розраховується за формулою:

$$\kappa = \left(\frac{I^2 R_0^2 \beta l}{2Ld\Delta R} - k \right) \left(1 - \frac{2}{nL} \right), \quad (1)$$

де R_0 – опір полоски l (рис. 1) при відсутності струму нагріву; β – температурний коефіцієнт опору провідного шару; ΔR – зміна опору полоски l під дією струму I ; k – поправка на випромінювання $k = 2(l^2 + lb)\alpha / d$; α – коефіцієнт тепловіддачі за рахунок випромінювання; $\left(1 - \frac{2}{nL}\right)$ – поправка на краєві ефекти $n^2 = (2\kappa d + 2l^2\alpha) / bl(\kappa_n\alpha + \kappa d)$; κ_n – теплопровідність провідного шару. Величини l, L, b, d вказані на рис. 1.

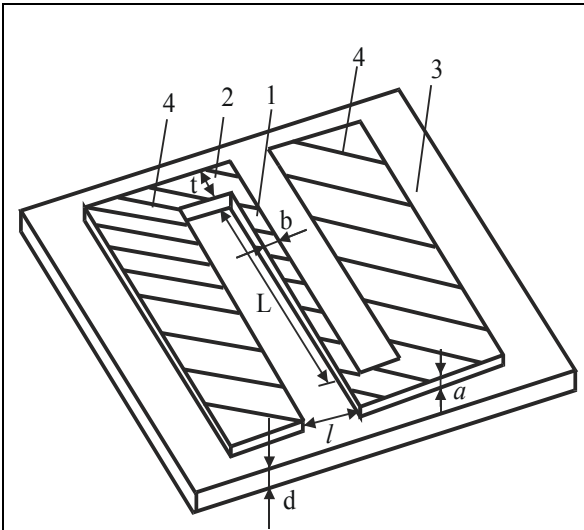


Рисунок 1 -Схема тонкоплівкового зразка для вимірювання теплопровідності: 1 — вузька провідна полоска; 2 – перемичка, 3 – підкладка; 4 – ізотермічні електроди, L – довжина провідної полоски, l – ширина зазору, b – ширина провідної полоски, a – товщина провідного шару, d – товщина підкладки, t – ширина перемички.

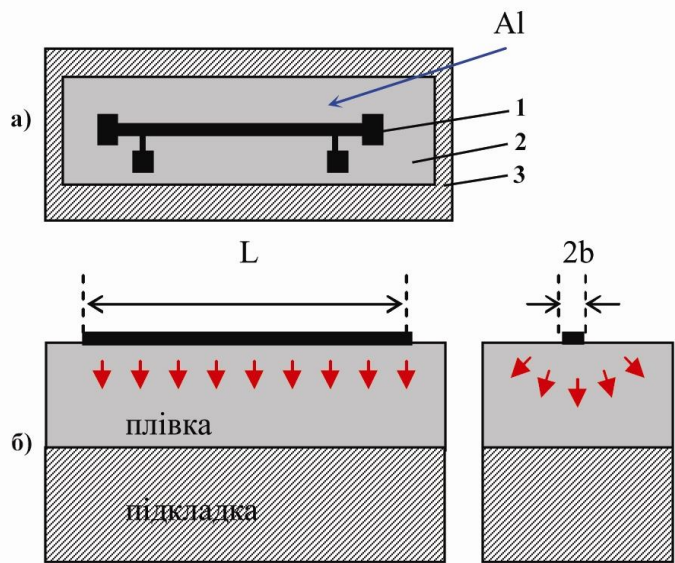


Рисунок 2 - Схема досліджуваної структури для вимірювання теплопровідності тонких плівок (а) та розподіл теплового поля (б): 1 – металева смужка, 2 – досліджуваний зразок (плівка), 3 – підкладка.

Три омега [2] є другим методом по вимірюванні термоелектричних параметрів тонкоплівкових конденсатів. Він одержується шляхом пропускання змінного струму з частотою ω через лінію метал нагрівач, який був безпосередньо нанесений на електроізоляційний зразок (рис. 2). Цей струм нагріває зразок з частотою 2ω завдяки джоулевого нагріву, виробляючи коливання температури також при частоті 2ω з амплітудою, скажімо, $\Delta T_{2\omega}$, і фазовою різницею. Оскільки опір чистих металів зростає лінійно з температурою, коливання температури створює осциляції опору в лінії металу з частотою 2ω . Осциляції опору при 2ω , з джерелом струму при частоті ω , створюють невеликі осцилюючі сигнали напруги на лінії металів з частотою 3ω [2].

Коефіцієнт теплопровідності розраховується за формулою:

$$\kappa = \frac{U^3 \cdot \ln \omega_2 / \omega_1}{4\pi LR^2 (U_{3\omega_1} - U_{3\omega_2})}, \quad (2)$$

де U – напругою живлення, $U_{3\omega}$ – третя гармоніка напруги, пов’язана з термічними втратами плівки, L – довжина металевої смужки-нагрівача, R – опір металевої смужки-нагрівача, індекси 1 і 2 стосуються двох різних частот.

Третій лазерний флеш-метод ґрунтується на вимірюванні часу поширення теплової хвилі, створеної лазерним імпульсом від однієї сторони плівки до протилежної (рис. 3). Використовуючи теорію, яка ґрунтується на одномірній моделі поширення тепла у напівобмеженому тілі, за умов відносно невеликого нагрівання, можна визначити коефіцієнт теплопровідності досліджуваного зразка [3].

Вираз для коефіцієнта теплопровідності записується так [3]:

$$\kappa = \rho CD, \quad (3)$$

де ρ - густина речовини досліджуваних плівок, C – теплоємність яка є сталюю, оскільки вона визначається розігрівом зразка, який в експерименті є не більшим ~ 1 К, D – температуропровідність, яка визначається половинним часом $t_{1/2}$, і товщиною зразка d , необхідним для досягнення T_{max} , $D = 1,38d^2 / \pi^2 t_{1/2}$.

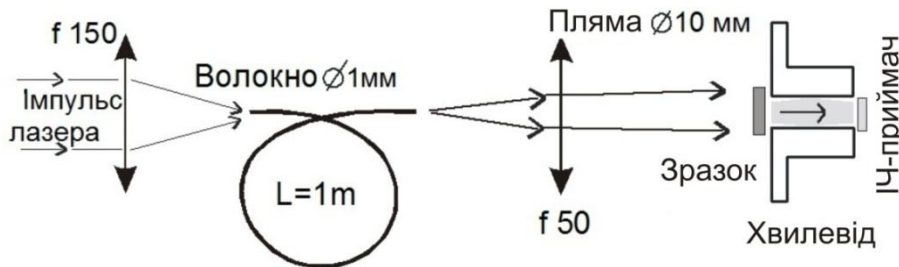


Рисунок 3 - Оптична система установки вимірювання теплопровідності тонких плівок лазерним флеш-методом.

1. Ю.А. Бойков, Б.М. Гольцман, С.Ф. Синенко, Приборы и техника эксперимента **2**, 230 (1975).
2. D.G. Cahill, Rev. Sci. Instrum. **61**, 802 (1990).
3. W.J. Parker, R.J. Jenkins, C.P. Butler, G.L. Abbot, J. Appl. Phys. **32**, 1679 (1964).

УДК 621.315.592

Дмитро Фреїк, Богдан Дзундза, Роман Лецин, Тарас Кушнір
*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

АВТОМАТИЗОВАНА УСТАНОВКА ДЛЯ ВИМІРЮВАННЯ КІНЕТИЧНИХ КОЕФІЦІЄНТІВ ТОНКИХ ПЛІВОК

У даній роботі розроблена електрична схема, та сконструйована діюча установка вимірювання електричних параметрів напівпровідникових плівок. Створена комп'ютерна програма що забезпечує автоматизацію вимірювань, реєстрацію і первинною обробку даних, з можливістю побудови графіків часових та температурних залежностей.

Вимірювання електричних параметрів напівпровідникових плівок – тип провідності, питомий електричний опір, концентрація носіїв заряду, рухливість, коефіцієнт термо-е.р.с. – проводили у постійних магнітних полях величиною (1,5-2) Тл. При вимірюванні плівкові зразки розташовувалися в тримачі типової конструкції з шістьма вимірювальними зондами (два струмових і чотири холлівських), двома термopарами (хромель-алюмель або мідь-константан), внутрішнім (градієнтним) і зовнішнім нагрівачами. Точність вимірювання температур складала 0,5-1,0 К, а магнітних полів $\pm 3\%$. Кріостати для створення низьких температур являли собою кварцові посудини Дьюара або посудини із пінопласту, заповнені рідким азотом і розміщені в зазорі магніту. Проміжні температури між азотною і кімнатною досягались підігрівом за допомогою електроспіралі, біфілярно намотаної на трубчасте осердя тримача зразка. Використання герметичної комірки дозволяє проводити вимірювання у вакуумі (10^{-3} - 10^{-4}) Па.

Виготовлення надійних омичних контактів, які не руйнують плівку і задовольняють всім необхідним вимогам, проводилися методами осадження срібла в поєднанні з позолоченими притискними контактами або пайки при $T < 400$ К. Тип провідності визначався за знаком термо-е.р.с.

Функціональна схема установки наведена на рис. 1. Основою вимірювального комплексу є цифровий мультиметр UNI-T UT804 який підтримує вивід даних на комп'ютер і в режимі вольтметра постійної напруги забезпечує роздільну здатність 0,01 мВ при точності 0,05 % та має режим автоматичного вибору діапазону вимірювання.

В якості керуючого пристрою вибрано мікроконтролер ATmega16, якій характеризується широко розвиненою периферією. Програма для мікроконтроллера написана на С в середовищі CodeWizardAVR. Зв'язок з комп'ютером на апаратному рівні забезпечується перетворювачем USB-UART, а на програмному за допомогою інтерпретатора текстових команд, що забезпечує двосторонній обмін даними між керуючою програмою на комп'ютері та мікроконтролером установки.

Комутація вольтметра і зняття спаду напруги на еталонному резисторі, зразку, струмових та холлівський парах контактів здійснюється послідовно за

допомогою шести герконових мікрореле блоку комутації.

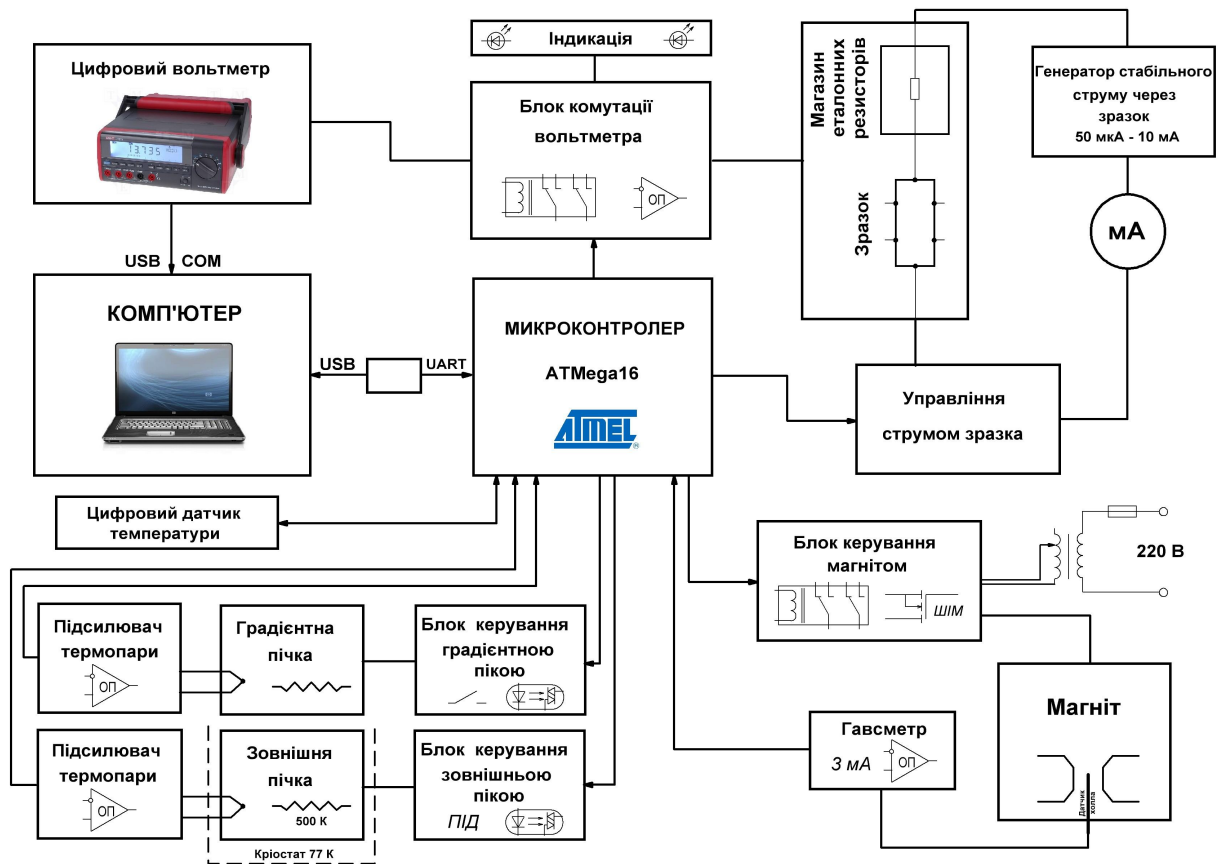


Рисунок 1 - Функціональна блок-схема установки автоматизованих вимірювань електричних параметрів напівпровідникових плівок.

Генератор стабільного струму через зразок зібраний на мікросхемі LM234 і має 12 дискретних значень струму які вибираються за допомогою галетного перемикача і контролюються амперметром. Увімкнення магніту та зміна полярності магнітного поля реалізована на електромеханічних реле, струм через магніт задається лабораторним автотрансформатором який включений перед випрямним мостом. Плавне збільшення струму через магніт до номінального при включенні та плавне зменшення до нуля при виключенні здійснюється за допомогою широтно-імпульсної модуляції (ШИМ). Вимірювання індукції магнітного поля реалізовано на датчику Холла який розміщується на виносному щупі в робочій зоні магніту.

Програма написана в середовищі Delphi і забезпечує реєстрацію даних з цифрового вольтметра, ручне та автоматизоване керування процесом вимірювань, попередню обробку та візуалізацію даних. Результати вимірювання кожного зразка зберігається в окремому файлі з можливістю подальшого продовження експерименту. Реалізована можливість вибору конкретних даних для експорту в MS Excel з метою їх подальшої обробки.

Робота частково виконана у рамках наукових проектів ДФФД України (державні реєстраційні номери 0112U003693) та МОН України (державний реєстраційний номери 0110U006281).

Богдан Лукіянець
Національний університет “Львівська політехніка”,
м. Львів, Україна

НАНООБ’ЄКТИ З ТОЧКИ ЗОРУ ЕЛЕКТРОНІКИ

В доповіді будуть висвітлені такі питання:

- визначення нанооб’єкта;
- нескінченно глибока потенційна яма як модель нанооб’єкта;
- характерні особливості нанооб’єкта і його фізичні прояви. Квантова ємність;
- супрамолекулярні структури як об’єкти високоємних накопичувачів енергії;
- ефекти тунелювання в струмоутворюючих реакціях;
- деякі висновки.

УДК 538.9

Василь Бойчук, Ігор Білинський, Роман Лешко, Леся Турянська

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
м. Дрогобич, Україна*

СПЕКТР СФЕРИЧНОЇ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ З ДВОМА ІОНАМИ ДОМІШКИ

Сучасний рівень розвитку технологій уможливорює виготовляти різні електронні, оптоелектронні прилади, лазери на основі низькорозмірних наносистем, різної форми, розмірів та конфігурації, шляхом використання квантових плівок, дотів, точок та їх поєднання. Однак незважаючи на високотехнологічний рівень виготовлення наносистем завжди існує ймовірність появи дефектів, зокрема домішкових атомів, які, як правило, потрапляють на поверхню нанооб'єкта. Крім цього домішка може потрапити в систему внаслідок легування.

Центральною характеристикою низькорозмірних структур є одноелектронні стани, знаючи які можна теоретично обчислювати всі властивості наносистем. Значна частина теоретичних робіт присвячена дослідженню однієї домішки у квантових точках (КТ) сферичної форми [1–4]. У випадку центральної домішки отримано точні розв'язки одноелектронного рівняння Шредінгера [1–2], враховано наявність поляризаційних зарядів на поверхні [3]. Також розроблено методи для обчислення нецентральної домішки у сферичній КТ [4]. Там же проведено обчислення оптичних параметрів від розташування домішки та розмірів КТ. Показано вплив поляризаційних зарядів на коефіцієнт поглинання світла.

У запропонованій роботі подано методологію обчислення енергетичного спектру та хвильових функцій КТ з двома домішками. Одержано залежності енергії системи від розташування домішки та від розміру КТ. Розглянуто окремо випадок розташування домішок на поверхні. Встановлено, що при довільному розташуванні двох іонів домішок знімається виродження за орбітальним і магнітним квантовими числами у порівнянні з випадком однієї центральної домішки чи випадком її відсутності. У роботі показано, що у для діаметрального розташування домішок зберігається виродження за модулем магнітного квантового числа.

1. М.В. Ткач, В.А. Головацький, Я.М. Березовский, Фіз. і хім. тверд. тіла **4**, 213 (2003).
2. V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko, Ukr. J. Phys. **53**, 991 (2008).
3. V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko. Condensed Matter Physics **11**, 653 (2008).
4. V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.Ya. Leshko, L.M. Turyanska, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **44**, 476 (2011).

УДК 537.221

Іван Орлецький, Василь Фрасуняк

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
м. Чернівці, Україна*

ФОТОЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ГЕТЕРОСТРУКТУР ІТО/n-GaP/n⁺-GaP, ВИГОТОВЛЕНИХ СПРЕЙ-ПІРОЛІЗОМ

Прилади на основі GaP характеризуються високою фоточутливістю до випромінювання ультрафіолетового і короткохвильового видимого діапазону спектру [1]. Для них характерною є підвищена термостабільність у порівнянні з класичними напівпровідниковими фотодіодами на основі кремнію. Електричні переходи володіють малими значеннями зворотного струму насичення. Дослідження умов виготовлення гетеропереходів на основі GaP за допомогою тонкоплівкової технології спреї-піролізу In₂O₃:Sn (ІТО) дозволяє використати переваги поверхнево-бар'єрних структур у порівнянні з гомопереходами в GaP і розширити область знань про фізичні процеси на межі поділу матеріалів.

Гетероструктури ІТО/n-GaP/n⁺-GaP виготовлялися на пластинах монокристалічного фосфіду галію електронної провідності з питомим електроопором 3 Ом·см і товщиною 200 мкм. Для зменшення опору контактів попередньо на пластинах формувалися ізотипні переходи n-n⁺. Перед нанесенням шару ІТО товщиною 0,15 мкм підкладки оброблялися у розчинах соляної кислоти та аміачно-перекисній суміші. Зовнішні контакти формувалися за допомогою індію із термообробкою при 180°C на завершальному етапі виготовлення. Структури ІТО/n-GaP/n⁺-GaP володіли яскраво вираженим ефектом випрямлення струму. Контактна різниця потенціалів становила $\varphi_k=0,6$ В при зосередженні вбудованого електричного поля у напівпровіднику n-GaP біля межі поділу ІТО/n-GaP. Висота потенціального бар'єру ІТО/n-GaP/n⁺-GaP в значній мірі залежала від режиму обробки підкладки у аміачно-перекисному розчині на завершальній стадії. Зразки ІТО/n-GaP/n⁺-GaP були фоточутливими при освітленні в природних умовах близьких до AM1,5, генеруючи струм 1,25 мкА/см² і напругу холостого ходу 0,32 В. Значення шунтуючого опору $R_{ш} = 1500$ Ом. Послідовний опір становив $R_{п} > 1500$ Ом і зумовлений неоптимізованою конфігурацією фронтального контакту зі сторони ІТО. Струм при прямому зміщенні у досліджуваних структурах ІТО/n-GaP/n⁺-GaP зумовлений рекомбінацією в області просторового заряду електронів і дірок. Коефіцієнт неідеальності вольт-амперної характеристики $n=1,95$. При прямих напругах $U>1,5$ В гетероструктури ІТО/n-GaP/n⁺-GaP проявляли світлодіодні властивості із випромінюванням у червоній області спектру.

1. Т.В. Бланк, Ю.А.Гольдберг, ФТП **37**, 1025 (2003).

УДК 538.9

В.І. Бойчук, І.В. Білинський, О.А. Сокольник, І.О. Шаклеїна
*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
м. Дрогобич, Україна*

ВПЛИВ ФОРМИ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ ГЕТЕРОСИСТЕМИ GaAs/AlAs НА КОЕФІЦІЄНТ ПОГЛИНАННЯ ПРИ МІЖРІВНЕВИХ ДІРКОВИХ ПЕРЕХОДАХ

Останнім часом квантові точки (КТ) привертають увагу дослідників не лише як об'єкт для вивчення цікавих фізичних властивостей наногетероструктури, але й як можливість для різноманітного застосування КТ у повсякденному житті.

У роботі для КТ GaAs у напівпровідниковій матриці AlAs досліджено вплив форми КТ на енергетичний спектр дірки та оптичні властивості, зумовлені міжривневими переходами заряду, на основі гамільтоніана 4×4 .

Нехтуючи гофрованістю ізоенергетичних поверхонь у k -просторі (сферичне наближення), гамільтоніан сферичної КТ можна записати у вигляді:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma \right) \mathbf{p}^2 - \gamma (\vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\mathbf{J}}) + \Pi(r). \quad (1)$$

Хвильову функцію, що є розв'язком рівняння з гамільтоніаном (1), задано як добуток власних функцій оператора повного моменту імпульсу і радіальних функцій.

Обчислення енергії діркових станів для КТ кубічної, еліпсоїдальної, циліндричної та тетраедричної форми проводились за допомогою теорії збурень з врахуванням гібридизації станів при зміні об'єму квантової точки.

Для кожної геометричної форми КТ розглядається випадок, коли її опромінено лінійно-поляризованим світлом вздовж осі z , що збігається з віссю симетрії форми квантової точки найвищого порядку.

Коефіцієнт поглинання світла, що зумовлений міжривневим переходом дірки із одного стану з енергією E_i в інший стан з енергією E_j , визначимо як

$$\alpha(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} \frac{\sigma |M_{i\alpha,j\beta}|^2 \hbar \Gamma_{i\alpha,j\beta}}{(E_j - E_i - \hbar\omega)^2 + (\hbar \Gamma_{i\alpha,j\beta})^2}, \quad (2)$$

де $\alpha = 1, 2, \dots, s_\alpha$, $\beta = 1, 2, \dots, s_\beta$, s_α - кратність виродження рівня i , s_β - кратність виродження рівня j , ω - частота електромагнітної хвилі, ε_0 - електрична стала, μ_0 - магнітна стала, ε - діелектрична проникність КТ, $\hbar \Gamma_{i\alpha,j\beta}$ - енергія релаксації, що зумовлена електрон-фононою взаємодією та іншими факторами розсіяння.

На основі проведених обчислень енергії та визначених хвильових функцій станів дірки встановлено правила відбору та досліджено залежність коефіцієнту міжрівневого діркового поглинання світла від форми та об'єму КТ.

Проведені обчислення дають змогу, на основі вимірювання $\alpha = \alpha(\omega)$, встановити форму КТ, яка суттєво впливає на оптичні характеристики гетероструктури.

УДК 538.9

Василь Бойчук, Ігор Білинський, Інна Шевчук, Любов Вороняк
*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
м. Дрогобич, Україна*

ПРИРОДА ЗСУВУ СТОКСА В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ ПОМІЩЕНИХ В НАПІВПРОВІДНИКОВУ МАТРИЦЮ

В результаті багаточисельних теоретичних і експериментальних досліджень напівпровідникових квантових точок (КТ) досягнуто значних успіхів в розумінні їх оптичних спектрів. Однією з важливих характеристик оптичних властивостей КТ є зсув Стокса. Питанням вивчення природи зсуву Стокса (ЗС), який на декілька порядків більший в квантово-розмірних структурах, ніж в об'ємних кристалах, присвячено немало як експериментальних, так і теоретичних робіт. У КТ величина і характер цього зміщення сильно залежить від багатьох факторів, що пов'язані з існуванням межі поділу середовищ і не має однозначного трактування.

Щоб пояснити екситонні спектри поглинання та люмінесценції квантових точок, необхідно розглянути електрон-діркові пари, що взаємодіють з поляризаційними фононами. Для малих КТ є експериментальні дані великих значень факторів Хуанга-Ріса (на два порядки більші, ніж в масивних кристалах). Неадіабатичний підхід застосовується, щоб пояснити неспівпадання між великими значеннями знайдених факторів Хуанга-Ріса експериментально і набагато меншим значенням, яке отримуємо з використанням адіабатичного наближення

Іншим фактором виникнення великого ЗС є наявність локальних станів на поверхні КТ. Вони можуть формуватися внаслідок неякісної пасивації обірваних зв'язків зовнішніх атомів.

Нерезонансну компоненту ЗС можна пояснити розподілом КТ за розмірами. Це пов'язано з тим, що положення максимуму смуги фотолюмінесценції в такому випадку формується в основному випромінюванням нанокристалів (НК) найбільших розмірів. Резонансний зсув Стокса пояснюється існуванням «темних» і «яскравих» екситонів, які отримуються унаслідок розщеплення основного екситонного стану за рахунок асиметрії форми, внутрішнього кристалічного поля і електрон-діркової обмінної взаємодії.

В роботі розглянуто системи з квантовими точками CdTe/ZnTe та GaAs/AlAs.

УДК 621.315.592

Василь Бойчук, Ігор Білинський, Роман Пазюк, Віталій Гольський
*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
м. Дрогобич, Україна*

СПЕКТР ЕЛЕКТРОНІВ ТА ЕКСИТОНІВ У НАДГРАТКАХ ЗІ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК

Завдяки цікавим фізичним властивостям напівпровідникові наногетеросистеми з масивами квантових точок стали елементною базою сучасних електронних пристроїв. Особливий інтерес в дослідників викликають системи впорядковано розташованих квантових точок (КТ) [1-2]. Інакше, у випадку хаотично розташованих КТ, де відстані між квантовими точками, як правило, є більшими за розміри самих КТ, задача зводиться до вивчення властивостей однієї квантової точки, яка поміщена у матрицю [3-4].

Теоретичні дослідження надграток квантових точок (НКТ) проводились як для надграток різних розмірностей [5], так і для КТ різної форми [6]. Для визначення енергій підбар'єрних підзон одновимірної надгратки сферичних квантових точок у роботі [7] використано наближення сильного зв'язку.

Нами визначено енергетичний спектр електронів та дірок НКТ сферичної форми гетеросистем GaAs/AlAs, GaSb/AlSb в наближенні найближчих сусідів. Розглянуто три-, дво- та одновимірні награтки квантових точок. Досліджено залежність енергії квазічастинок від хвильового вектора, радіуса квантової точки та відстаней між ними. Проаналізовано генезис енергетичного спектру електронів та дірок при зміні вимірності НГ. Для моделі квадратної НКТ гетеросистеми GaSb/AlSb розглянуто процеси поглинання фотонів і обчислено коефіцієнти поглинання $\alpha(\omega)$. Встановлено, що залежність $\alpha = \alpha(\omega)$ змінюється із зміною радіуса КТ, так і при зміні відстаней між ними.

1. И.В.Дмитриев, Р.А.Сурис, ФТП **36**, 1460 (2002).
2. Г.В.Караваев, С.Н.Гриняев, ФТТ **48**, 701 (2006).
3. Н.В.Ткач, А.М.Маханец, Г.Г.Зегря, ФТП **36**, 543 (2002).
4. И.В.Дмитриев, Р.А.Сурис, ФТП **36**, 1449 (2002).
5. В.І. Бойчук, І.В. Білинський, Р.І. Пазюк, І.О. Шаклеїна, ФХТТ **10**, 752 (2009).
6. В.І. Бойчук, В.Б. Гольський, ФХТТ **8**, 81 (2007).
7. В.В.Стрельчук, П.М.Литвин, А.Ф.Коломыс, М.Я.Валах, Yu.I. Mazuz, Zh.M. Wang., G.J.Salamo, ФТП **41**, 74 (2007).

Н.К. Товстюк^{1,2}, Т.Д. Крушельницька¹
¹Національний університет "Львівська політехніка",
²Львівський національний університет імені Івана Франка,
м. Львів, Україна

УМОВИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДУ В ПІДСИСТЕМІ ЛІТІЄВОГО ІНТЕРКАЛЯНТА В ШАРУВАТИХ КРИСТАЛАХ

Досить актуальними для технічного застосування залишаються останнім часом сильно анізотропні кристали, серед них і шаруваті. Особливості структури шаруватих кристалів дозволяють шляхом інтеркаляції формувати в їх Ван дер Ваальсових щілинах нанопрошарки. При цьому відбуваються зміни в структурі самої матриці кристалу, пов'язані як зі структурними переходами, так і з поступовою перебудовою ґраткової системи. Впроваджені в кристал іони літію можуть займати нееквівалентні положення, розташовуючись у порожнинах з різною геометрією оточення. Імовірність заповнення порожнин різного типу інтеркалянтом визначається статистичним розподілом і залежить від локальних енергій інтеркальованих частинок в порожнинах ($\varepsilon_A, \varepsilon_B$), а також від температури.

В даній роботі вивчено умови фазового переходу в підсистемі літійового інтеркалянта в шаруватих кристалах на прикладі Bi_2Se_3 та Bi_2Te_3 . Енергетичні параметри, які використовуються (хімічний потенціал, енергії $\varepsilon_A, \varepsilon_B$), оцінені за результатами вимірювань зміни положення рівня Фермі, яка визначалась електрохімічним аналогом методу Мотта-Шоткі [1], та розрахунками енергії основного стану літію [2].

На основі підходу, що ґрунтується на моделі ґраткового газу, встановлюється зв'язок між хімічним потенціалом μ і концентрацією інтеркалянта x . Показано, що різниця між заповненнями „гостьових” порожнин A і B є максимальною при низьких температурах ($T \rightarrow 0$) і зменшується при зростанні температури. В рамках даної моделі перерозподіл інтеркалянта між порожнинами різного типу є можливим при зміні локальних енергій ε_A та ε_B частинок у порожнинах як під впливом зовнішніх факторів (наприклад, тиску) так і за рахунок взаємодії між частинками інтеркалянта у кристалічній матриці. Показано, що така взаємодія призводить до того, що перерозподіл між різними позиціями може набути характеру фазового переходу першого роду, відбуваючись стрибкоподібно. Цей ефект має місце при температурах, нижчих за певне критичне значення, або ж при достатньо сильній взаємодії.

1. И. И. Григорчак, Б.А. Лукиянец, З.Д. Ковалюк и др., ФТП **23**,– 2083 (1989).
2. M.V. Kudriashova, N.M. Harrison, S.W. de Leeuw, Phys. Rev. Letters **86**, 1275 (2001).

Р.І. Лесюк, Б.К. Котлярчук, Я.В. Бобицький

*Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України,
Національний університет "Львівська політехніка",
м. Львів, Україна*

ФОРМУВАННЯ НАНОЗЕРНИСТИХ ТОВСТИХ ПЛІВОК СРІБЛА ЯК СТРУМОПРОВІДНИХ ЕЛЕМЕНТІВ ДРУКОВАНИХ ПЛАТ

Протягом останнього десятиріччя метод струменевого друку електронних плат наночастинками металів пройшов шлях від концептуальної ідеї до технології на порозі впровадження. Основними матеріалами, що забезпечують струмопровідну функцію у так званих "наночорнилах" є срібло та мідь, методи пост-обробки яких істотно різняться внаслідок різної хімічної стійкості цих металів. Серед таких методів найефективнішими виявили себе термічне спікання, лазерне спікання, які використовуються для срібних наночастинок і детальніше представлені у попередніх роботах [1, 2], а також фотонне спікання, що дає змогу за короткі проміжки часу спікати мідні частинки.

У даній роботі представлено результати досліджень змін у структурі товстих плівок, сформованих спіканням наночастинок срібла – поки єдиного металу, що задовольняє технологію з позиції "ціна/якість/електропровідність". Як відомо, при зменшенні розмірів зерна нанокристалічних матеріалів, зокрема металів і їх сплавів (Cu, Pd, Fe, Ni), знижується питома електропровідність плівки.

Струмопровідні товсті плівки срібла формувались нанесенням колоїду срібла із середнім розміром частинок ≈ 9 нм на підкладки із наступною термічною обробкою в печі відпалу. Показано, що питома електропровідність сформованих зразків струмопровідних доріжок у вигляді товстих плівок срібла на початку спікання є незначною і зростає із збільшенням тривалості спікання та температури спікання. Було встановлено, що після ≈ 60 хвилин спікання електропровідність зразків перестає зростати (рис. 1), а на часовому відрізку 60–120 хвилин спостерігалось незначне зниження електропровідності, що пов'язано із станом поверхні, яка модифікується в атмосфері повітря під час спікання. Динаміка зміни мікротвердості в загальному відповідає кривим зміни питомої електропровідності (рис. 2.). Мікротвердість зразків, що спікались при оптимальних режимах з огляду на електропровідність, становила 0.87 ГПа. Показано, що на відрізку 250–300 °С мікротвердість зростає без значного зростання питомої електропровідності.

Методами скануючої електронної мікроскопії (SEM) та рентгенодифракції досліджено зміну середнього розміру зерна в залежності від температури та тривалості спікання. Показано, що на поверхні плівки розмір зерна більший (SEM) за середній по об'єму і складає 50–130 нм після спікання при 150 °С і 100–250 нм після спікання при 300 °С (тривалість обробки 60 хв). Результати

рентгено-дифракційного вимірювання (досліджувались положення дифракційних максимумів відбиття, періоди ґратки, розміри кристалітів і напруження) показали зростання розміру зерна при зростанні температури спікання частинок срібла (рис. 3.), а також появу оксидної фази після тривалої термообробки плівки. Фазовий склад визначали методом рентгенівського фазового аналізу на рентгенівському дифрактометрі ДРОН-3.0 (монохроматичне $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання, фокусування за схемою Бреґга – Бретано).

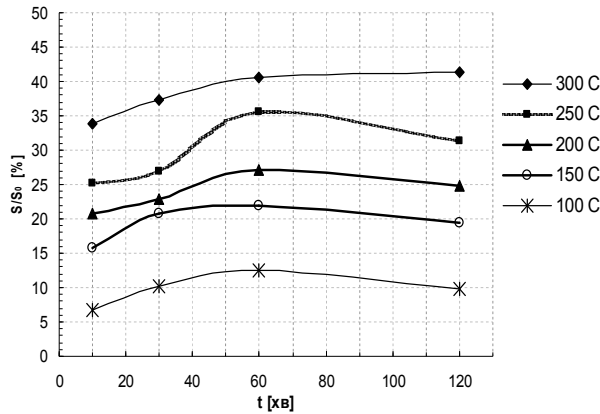


Рисунок 1 - Залежність питомої електропровідності (п.е.) у відсотках відносно п.е. об'ємного срібла від часу спікання при різних температурах обробки для колоїдів із ваговим вмістом срібла 36,6%.

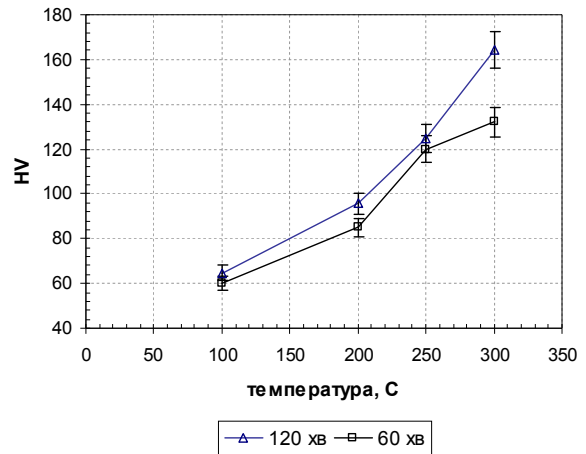


Рисунок 2 - Зміна мікротвердості срібних шарів в залежності від температури спікання.

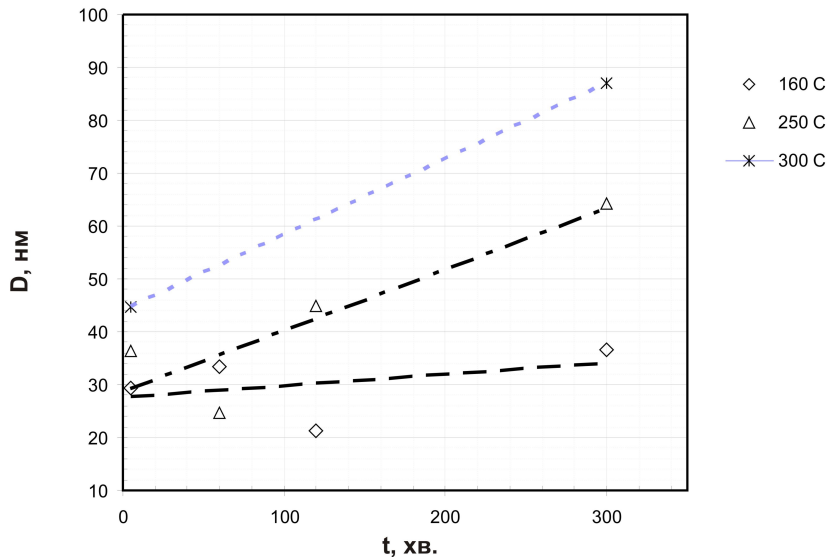


Рисунок 3 - Залежність розміру кристаліта від часу спікання (у хв.) при температурах 160, 250 і 300 °С.

Відомий аналітичний опис питомого опору полікристалічної плівки в рамках моделі Mayadas-Shatzkes [3], згідно якого відношення питомих опорів спрощено записується [4]: $\rho_0 = \rho_{cryst} \frac{l_{cryst}}{l_0}$, де ρ_0 , ρ_{cryst} – питомий опір

монокристалу і полікристалічної плівки; l_0 , l_{cryst} – довжини вільного пробігу електрона у моно- і полікристалі. Прийmemo для срібла $l_0=45$ нм [5]. Тоді для плівок нанокристалічного срібла розрахуємо довжину вільного пробігу електрона (табл.1):

Використовуючи коефіцієнт розсіювання електронів (r) при перетинанні границь розділу кристалітів, можна записати відношення для зміни питомого опору [2]: $\ln\left(\frac{\rho_{cryst}}{\rho_0}\right) = \frac{l_0}{\langle D \rangle} \ln\left(\frac{1}{r}\right)$, де $\langle D \rangle$ - середній розмір кристаліту. Звідси розраховано коефіцієнт розсіювання електронів для нашого випадку (табл.1). Дані результати говорять про значну роль ефекту зернограничного розсіювання у підвищенні питомого опору товстих плівок нанокристалічного срібла, сформованих методом спіканням наночастинок срібла.

Табл.1.

$T_{\text{спікання}},$ °C	$t_{\text{спікання}},$ хв.	$\langle \rho_{cryst} \rangle,$ мкОм·см	$l_{cryst},$ нм	$r,$ -
250	60	4.52	15.93	0.44
250	120	5.13	14.03	0.337
300	60	4.13	17.43	0.327
300	120	3.96	18.18	0.288

У підсумку треба зазначити, що процес спікання і росту зерна супроводжується підвищенням питомої електропровідності та мікротвердості нанокристалічної плівки срібла. Одним з механізмів росту зерна при витримуванні зразків протягом $t > 5$ хв. в печі є міжзеренна дифузія. Однак первинне утворення кристалітів розмірами 30–50 нм при часі обробки $t < 5$ хв. носить стрибкоподібний характер і пов’язується із коалесценцією наночастинок срібла внаслідок розмірного ефекту плавлення [6]. Володіючи питомою електропровідністю на рівні 40% від питомої електропровідності масивного срібла, досліджувані плівки можуть ефективно використовуватись в якості струмопровідних покриттів і доріжок мініатюрних друкованих плат.

1. Р. Лесюк, Я. Бобицький, В. Їллек, В.К. Савчук, Б.К. Котлярчук, *Матеріали ІХ міжнародної науково-практичної конференції CIET-2008*, (Одеса, Україна, 2008), с. 111.
2. R. Lesyuk, W. Jillek, Y. Bobitski, B. Kotlyarchuk, *Microelectronic Engineering* **88**, 318 (2011).
3. A.F. Mayadas, M. Shatzkes, *Phys. Rev. B* **1**, 1382 (1970).
4. А.И. Гусев, *Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии* (Физматлит, Москва, 2005), с. 339.
5. В.Ф. Киселев, С.Н. Козлов, А.В. Зотеев, *Основы физики поверхности твердого тела* (Москва, 1999), с. 48.
6. T. Castro, R. Reifenberger, *Physical Review B* **42**, 8548 (1990).

УДК 546.48'24-022.532

Михайло Смолінський, Андрій Савчук, Вікторія Ткачук
*Чернівецький національний університет ім. Юрія Федьковича,
м. Чернівці, Україна*

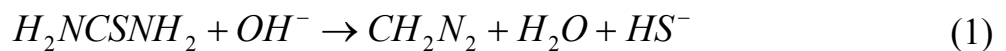
СИНТЕЗ НАНОКРИСТАЛІВ СУЛЬФІДУ КАДМІЮ МЕТОДОМ УЛЬТРАЗВУКОВОГО СПРЕЙ-ПІРОЛІЗУ

Нанокристалічний сульфід кадмію привертає останнім часом велику увагу, оскільки його ширина забороненої зони коливається в межах від 4,5 до 2,5 еВ, в залежності від середнього розміру наночастинок, що відкриває широкі перспективи застосування даного матеріалу в оптоелектронних пристроях ультрафіолетового та видимого діапазонів [1].

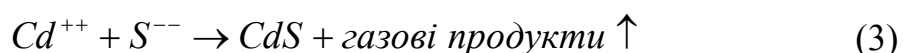
Важливим аспектом успішного застосування наноструктурованих матеріалів в прикладних цілях є розвиток технологічних методик синтезу. Ультразвуковий піроліз аерозолів є передовою технікою, що дозволяє масово підготувати наноструктуровані порошки з вузьким розподілом частинок за розмірами. Розмір частинок у вигляді порошку можна легко контролювати, варіюючи концентрацію джерела розчину або параметрів розпорошення [2].

Методом ультразвукового спреї-піролізу було синтезовано нанокристалічний сульфід кадмію. В якості прекурсорів були вибрані хлорид кадмію ($CdCl_2$) як носій іонів Cd^{++} та тіосечовина (H_2NCSNH_2) як носій іонів S^{--} . Співвідношення прекурсорів було 0,005:0,01. Розчин прекурсорів був переведений в ультрадисперсний туман за допомогою ультразвукового нібулайзера (1,7 МГц).

Отриманий ультрадисперсний туман розчину прекурсорів за допомогою газу-носія (повітря) переносився в гарячу область пічки. Реакційну піч можна умовно поділити на дві зони. У першій зоні відбувається випаровування розчинника. У другій відбувається реакція піролізу за схемою:



У присутності іонів металу кадмію реакція буде відбуватись за наступною схемою:



Утворені в другій зоні нанокристали на виході пічки проходили стадію охолодження та барботувались у водному розчині полівінілового спирту (ПВС), який виконував роль стабілізатора для попередження процесів коагуляції.

Досліджено вплив температури піролізу на оптичні властивості синтезованих наноконкомпозитів.

Вимірювання оптичних спектрів проводилось на спектральному комплексі, який включав дифракційний монохроматор МДР-23. За величину E_g приймалась енергетична відстань між найнижчими дірковим та електронним квантово-розмірними рівнями E_{01}^h та E_{01}^e .

Як відомо, при відсутності дисперсії нанокристалів за розмірами, спектр поглинання складався б із набору ліній, які обумовлені переходами між рівнями енергії електронів і дірок. В вирощених структурах має місце дисперсія розмірів нанокристалів, це призводить до того, що спектри поглинання представляють собою криві, які огинають смуги поглинання частинок визначеного розміру. Вважається, що для аналізу спектрів з поганою роздільною здатністю найкраще використовувати залежності першої похідної оптичної густини, це дозволяє більш точно визначити перегини на смугах поглинання. Середній діаметр синтезованих нанокристалів визначався в рамках наближення ефективних мас [3]. Вважається, що наведені в роботі залежності відповідають середньому розміру.

Результати представлені в таблиці 1.

Таблиця 1

Зразок	Температура піролізу, °C	E_g , eV	Діаметр наночастинок, нм
CP1	250	2,65	6,5
CP2	300	2,6	7,38
CP3	350	2,53	9,44
CP4	400	2,47	14
CP5	450	2,45	18
CP6	500	2,44	22

Показано, що методом ультразвукового спреї-піролізу можна синтезувати нанокристали CdS, які володіють квантово-розмірним ефектом, що підтверджується наявністю короткохвильового зсуву краю власного поглинання. Змінюючи температуру піролізу, вдалось отримати нанокристали різного розміру. Встановлено, що залежність середнього розміру синтезованих нанокристалів від температури піролізу має близький до лінійного характер, що дозволяє синтезувати за даною методикою нанокомпозити із наперед заданими оптичними властивостями.

1. M. Baykull, H. Rüzgar, E. Arman, Y. Baş, Phys. Stat. Sol. (c) **7**, 423 (2010).
2. C. Rao, Int. J. Nanosci. **4**, 811 (2005).
3. S. Baskoutas, A.F. Terzis and W. Schommers, J. Comput. Theor. Nanosci. **3**, 269 (2006).

УДК 541.136.2

Д.В. Матулка, І.І. Григорчак, Б.А. Лукіянець
Національний університет „Львівська політехніка”,
м. Львів, Україна

Li⁺ - ІНТЕРКАЛЯЦІЙНЕ СТРУМОУТВОРЕННЯ У СУПРАМОЛЕКУЛЯРНИХ АНСАМБЛЯХ ІЄРАРХІЧНОЇ АРХІТЕКТУРИ

Синтезовано дублетноматричну ієрархічну структуру конфігурації <молекулярно-граткова матриця МСМ-41<гідрохінон>>. Її застосування в катодному процесі Li⁺ - інтеркаляційного струмоутворення показало суттєве підвищення зміни вільної енергії Гіббса реакції, покращення структури розрядної кривої та практичну сталість коефіцієнта дифузії впродовж всього процесу розряду.

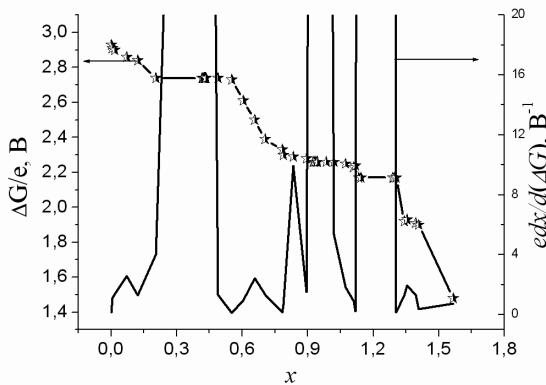


Рисунок 1 - Зміна енергії Гіббса процесу літєвої інтеркаляції МСМ-41<гідрохінон> (точки) та відповідна диференціальна ємність як функції ступеня гостьового навантаження

На рис. 1 наведена зміна енергії Гіббса процесу літєвої інтеркаляції як функція тривалості гальваностатичного розряду для супрамолекулярного ансамблю ієрархічної архітектури МСМ-41<гідрохінон>. На концентраційній осі гостьового навантаження (x) наявні інтервали незалежності зміни вільної енергії Гіббса ($\Delta G(x)$) реакції впровадження Li⁺, для яких похідні $\partial x / \partial(\Delta G)$ прямують до безмежності, що вказує на фазові переходи першого роду, тобто на існування в зазначених інтервалах двохфазних областей.

З метою з'ясування кінетичних параметрів струмоутворення в синтезованих дублетноматричних структурах були побудовані діаграми Найквіста (рис. 2) – залежність уявної частини комплексного імпедансу від його дійсної складової. Їхній вигляд при різних значеннях ступеня „гостьового” навантаження МСМ-41<гідрохінон<Li_x>> показаний на

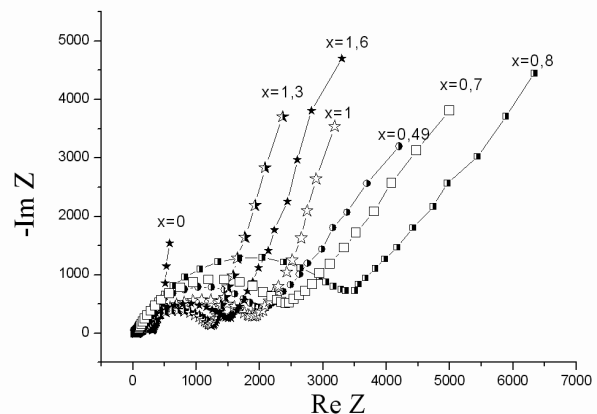


рис. 2. Бачимо, що при $0 < x < 1$ лімітуючими є процеси перенесення заряду з електроліту в

Рисунок 2 - Діаграми Найквіста для МСМ-41<гідрохінон<Li_x>>

дублетноматричну структуру та дифузійні процеси в ній, оскільки діаграми Найквіста дуже близькі до тих, які відображаються моделлю Рендлса-Ершлера. При $x > 1$ нахил низькочастотних віток стає більшим від 45° і залишається практично сталим. Водночас немонотонність зміни довжини хорди високочастотної дуги вказує на прояв механізмів перенесення заряду через потенціальний бар'єр “проміжний господар /субгосподар”.

Кінетика процесів інтеркаляційного струмоутворення вивчалася методом імпедансної спектроскопії.

Отримані діаграми промодельовались еквівалентною електричною схемою. Перевірка адекватності побудованої моделі пакету експериментальних даних показала добрі результати: коефіцієнт Крамерса-Кроніга не перевищував $3 \cdot 10^{-5}$, різниці частотні залежності першого порядку мали повністю випадковий характер.

З метою з'ясування механізму досліджуваних струмоутворюючих процесів був проведений комплексний аналіз температурних залежностей їхніх термодинамічних і кінетичних параметрів. Це дало змогу визначити зміну ентропії процесу струмоутворення $\Delta S(x, T)$ як функції температури та ступеня „гостьового навантаження”. Загалом, ентропія розчинення літію, як видно, є немонотонною (осцилюючою) функцією як ступеня інтеркаляції, так і температури.

Для пояснення отриманих результатів пропонується теоретична модель.

УДК: 539.2, 669.24

Д.В. Матулка, І.І. Григорчак, Б.А. Лукіянець
Національний університет „Львівська політехніка”,
м. Львів, Україна

ІМПЕДАНСНИЙ ВІДГУК ТА КВАНТОВА ЄМНІСТЬ КЛАТРАТИВ КОНФІГУРАЦІЇ НЕОРГАНІЧНИЙ НАПІВПРОВІДНИК/ОРГАНІЧНИЙ КОНТЕНТ

В пропорованих експериментах базовим об’єктом (матеріалом – “господарем”) служили шаруваті напівпровідники - селеніди галію (*GaSe*) та індію (*InSe*).

З допомогою інтеркаляційних технологій були сформовані супра-молекулярні структури з органічними акцепторами (родамін С (РС), родамін (РЖ)), барвниками (метиленовий синій (МС)), а також олігомерами (з оліго-диметиламіно-метакрилатом), тобто, були сформовані наступні структури: $X<PC>$, $X<MC>$, $X<PЖ+МС>$, $X<ОДМ>$ ($X = Ga, In$).

Дослідження проводились методом імпедансної спектроскопії. Імпедансні виміри виконувались в напрямку *C* – осі в діапазоні частот $10^{-2} \div 10^5$ Гц. Аналіз частотних залежностей комплексного імпедансу *Z* проводився графоаналітичним методом з допомогою програмного пакету *ZView 2.3*.

Властивості структури конфігурації напівпровідник/родамін С суттєво міняються при накладанні в процесі синтезу електричного поля та освітлення.

На рис. 1 наведені діаграми Найквіста для наноструктури *InSe<PC>*. Поява високочастотних горизонтальних віток (криві 2 і 3 на рис. 1), природа яких найімовірніше пов’язана з квантовою ємністю (C_Q), зумовленою, як дискретизацією енергетичного спектру нанопрошарків *InSe*, так і кінечністю часів тунелювання.

Годографи імпедансу (рис. 2) для *InSe<ОДМ>* являють собою лінії, практично паралельні до осі значень уявної частини комплексного імпедансу, за винятком хіба що найнижкочастотнішого δ -околу. Якщо така поведінка поза зазначеним околом з високою точністю моделюється послідовно з’єднаними резистором і конденсатором, то в ньому ситуація є складнішою. Так, для більш розширеної матриці селеніду індію найнижкочастотніша вітка годографу

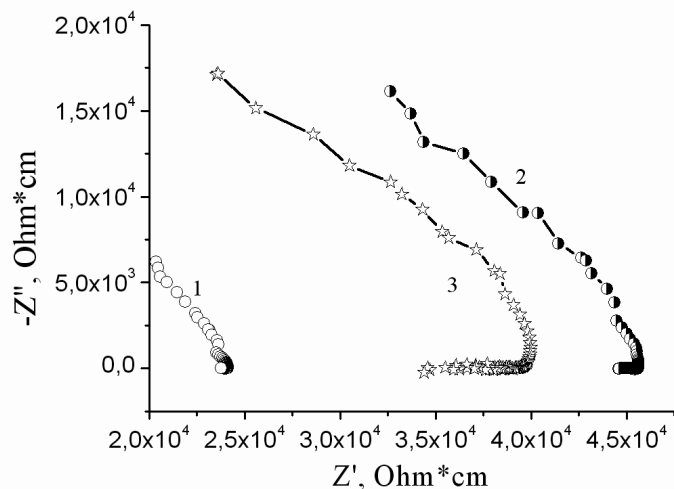


Рисунок 1 - Діаграми Найквіста для наноструктури *InSe<PC>*, синтезованої у електричному і виміряні в темряві (2) та при освітленні (3). (1) – вихідна розширена матриця.

імпедансу вказує на візуалізацію квантової ємності C_Q , зумовленої як дискретизацією енергетичного спектру нанопрошарків *InSe*, так і кінечністю часів тунелювання.

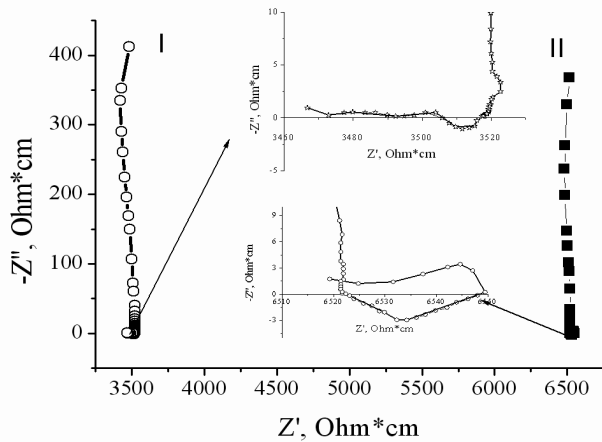


Рисунок 2 - Діаграми Найквіста, побудовані для напрямку, перпендикулярного до шарів наноструктури *InSe*<ОДМ > зі ступенню розширення 2 – (II), та 4–(I).

Для коінтеркалатних структур *GaSe*<МС+РЖ>, синтезованих в електричному полі з одночасним освітленням, характерним є нівелювання змін кінетичних властивостей, викликаних одним із гостьових компонентів. Найімовірніший механізм цього явища - блокування зарядового обміну *GaSe* \Leftrightarrow МС більш вигідним донорно-акцепторним обміном МС \Leftrightarrow РЖ. Однак діелектричні властивості міняються більш суттєвим чином.

Поведінка *InSe*< МС+РЖ > синтезованої за нормальних умов є аналогічною до *GaSe*<МС+РЖ>. При накладанні електричного поля разом з освітленням під час синтезу дещо деформується середньочастотна вітка дійсної складової комплексного імпедансу.

Для структури *InSe*<МС> в темряві низькочастотна вітка, переходячи у

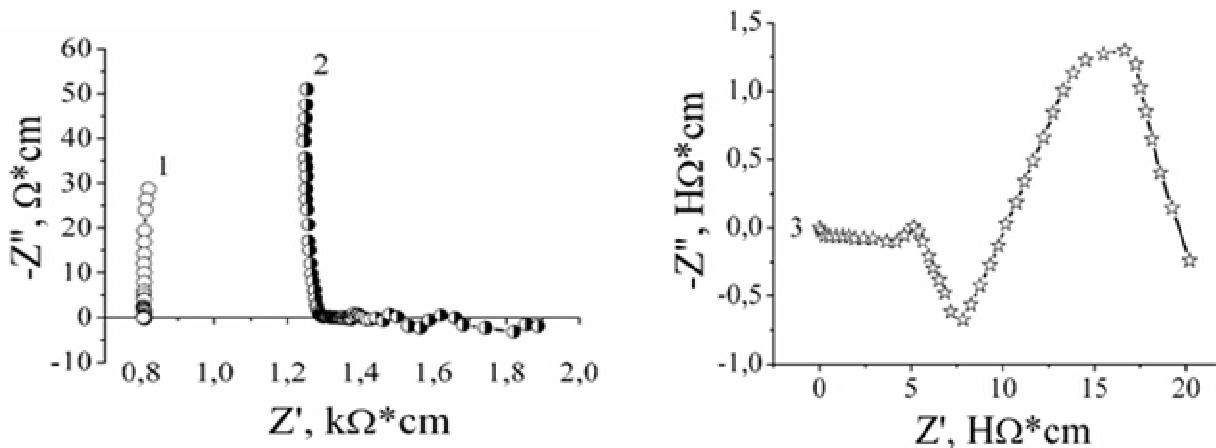


Рисунок 3 - Діаграми Найквіста, побудовані для напрямку, перпендикулярного до шарів наноструктури *InSe*<МС> в темряві – (2) та при освітленні –(3). (1) – вихідна розширена матриця.

IV- «індуктивний» квадрант комплексної площини осцилює навколо осі абсцис (крива 2 на рис. 3). При освітленні індуктивний відгук спостерігається уже у високочастотній області (крива 3 на рис. 3).

При входженні олігомеру в чотирьохкратно розширену матрицю *GaSe* спостерігається відповідність між деформацією низькочастотної вітки $\rho(\omega)$ і подібною як у випадку *InSe*<MC>, перехід відповідної вітки діаграми Найквіста у IV-«індуктивний» квадрант комплексної площини (рис. 4).

Нами були проведені теоретичні розрахунки квантової ємності для наноструктур різної електричної природи.

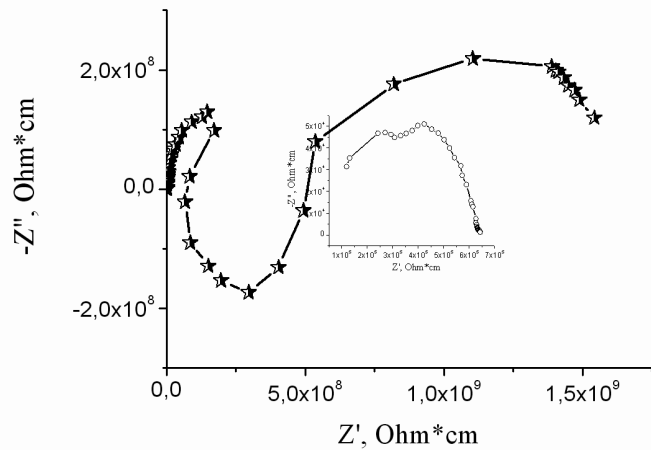


Рис. 4 - Діаграми Найквіста, побудовані для напрямку, перпендикулярного до шарів чотирьохкратно розширеної матриці *GaSe* (вставка до рисунку) та наноструктури на її основі *GaSe*<ОДМ>

УДК 541.136.88, 541.135, 544.65

Андрій Курепа, Богдан Бахматюк
*Національний університет "Львівська політехніка",
м. Львів, Україна*

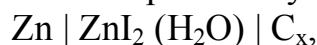
ДОСЛІДЖЕННЯ ІНТЕРКАЛЯЦІЇ ЙОДУ НА ПОВЕРХНІ АКТИВОВАНОГО ВУГЛЕЦЕВОГО МАТЕРІАЛУ

Суперконденсатори - це новітні системи живлення, в яких протікають квазіоборотні електрохімічні заряд-розрядні процеси і форма гальваностатичних зарядних і розрядних кривих яких близька до лінійної [1]. Вони поділяються на [2]:

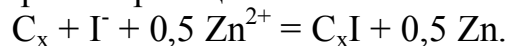
- Електрохімічні конденсатори подвійного електричного шару. Заряд в яких накопичується за електростатичним механізмом, а відстань між обкладками складає кілька ангстрем [1].
- Псевдоконденсатори. У яких заряд накопичується за рахунок швидких оборотних фарадеєвських реакцій [3].
- Гібридні електрохімічні суперконденсатори (ГЕСК). Які об'єднують два попередні види суперконденсаторів, оскільки на одному з електродів переважає фарадеївське накопичення заряду, а на іншому – електростатичне [2,4].

Матеріалом робочого електроду обрано активовані вуглецеві матеріали, що завдяки розвиненій пористій поверхні, залишаються найбільш розповсюдженими матеріалами для створення електродів усіх видів суперконденсаторів. Відомо, що йод здатний інтеркалюватися в структуру вуглецевих матеріалів [5,6] і, якщо використовувати оборотний процес електросорбції інтеркаляції йоду в порах вуглецевих матеріалів, можна досягнути значного покращення параметрів ГЕСК [7]. У якості фарадеївського протиелектроду обрано металевий цинк.

Таким чином було реалізовано електрохімічну систему:



що працювала на добре оборотній реакції:



Отже, в роботі за допомогою методів електрохімічної імпедансної спектроскопії, дослідження спектрів комбінаційного розсіяння та малокутового розсіювання рентгенівських променів, гальваностатичного та потенціодинамічного циклювань досліджено процес заряду-розряду пористої структури активованих вуглецевих матеріалів іонами йоду, в системі ГЕСК.

Отримані результати дозволили говорити про паралельне існування двох механізмів заряду поверхні активованого вуглецевого матеріалу іонами йоду: електростатичне накопичення іонів на межі розділу електрод-електроліт (рис. 1а), при низькій різниці потенціалів; псевдоємнісне накопичення заряду за рахунок електросорбції йоду на поверхні матеріалу (рис. 1б), при перевищенні певного потенціалу (потенціалу розблокування електроду [2]).

Ґрунтовне вивчення прототипу ГЕСК, та його електродів, дозволило змоделювати процес заряду пористої структури матеріалу іонами йоду та скласти еквівалентну електричну схему (ЕЕС) роботи пристрою оснований на цьому процесі (рис.2).

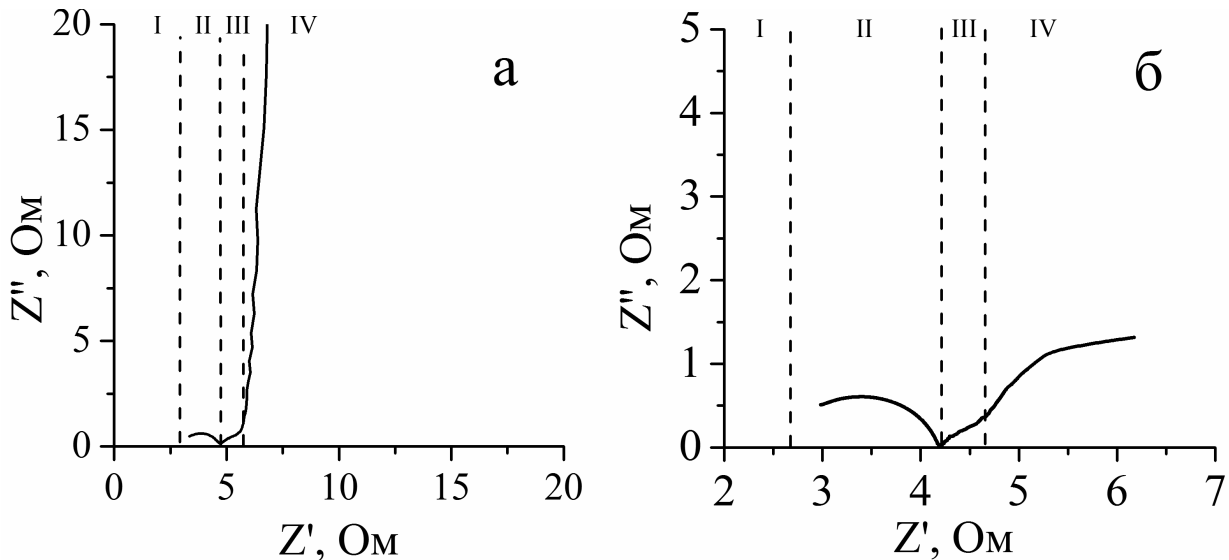


Рисунок 1 - Імпедансні діаграми Найквіста для ГЕСК за різних режимів роботи: а – суперконденсатор, б – псевдоконденсатор.

Розроблена ЕЕС заснована на розбитті імпедансної діаграми Найквіста на чотири області, кожна з яких відповідає за певний електричний, або-ж електрохімічний, процес, що протікає в системі при даній тривалості збурення. Важливо відмітити, що ці області розрізняються у всьому інтервалі робочих потенціалів поляризації вугільного електроду. За основу взята добре відома драбинчаста модель де-Леві [8].

Перша область відповідає віддаленню найбільш високочастотної точки від початку координат. Ця область моделюється опором і визначає частото незалежний опір носіям струму. Який складається з опору електронам провідності струмовиводів та провідних частинок електроду, а також іонного опору електроліту. На рис.1 вона позначена як I, а її модельне представлення на рис. 2 позначене як R_{00} .

Наступна область – це дуга у високочастотній області діаграми Найквіста, яка відповідає бар'єру при перенесенні заряду з струмопровідних елементів системи у вуглець [9] (на рис. 1 вона позначена як II). Вона моделюється паралельно підключеними ємністю та опором (на рис. 2 позначене як R_0 та C_0).

III та IV області відповідають за заряд пористої структури матеріалу, а їх модельне представлення залежить від режиму роботи ГЕСК. Так, наприклад, для псевдоконденсатора III область (рис. 1б) об'єднує всі елементи з індексами DL, а IV область моделюється частиною ЕЕС розміщеною під штриховою лінією. А у суперконденсаторному режимі роботи ділянка ЕЕС під відсутня взагалі, і тому розмежування між III та IV областями (рис.1а) діаграми Найквіста відбувається по розподілу пор за їх діаметрами. Так III область

об’єднує собою процеси накопичення заряду, що протікають у макропорах та мезопорах, а IV – у мікропорах матеріалу.

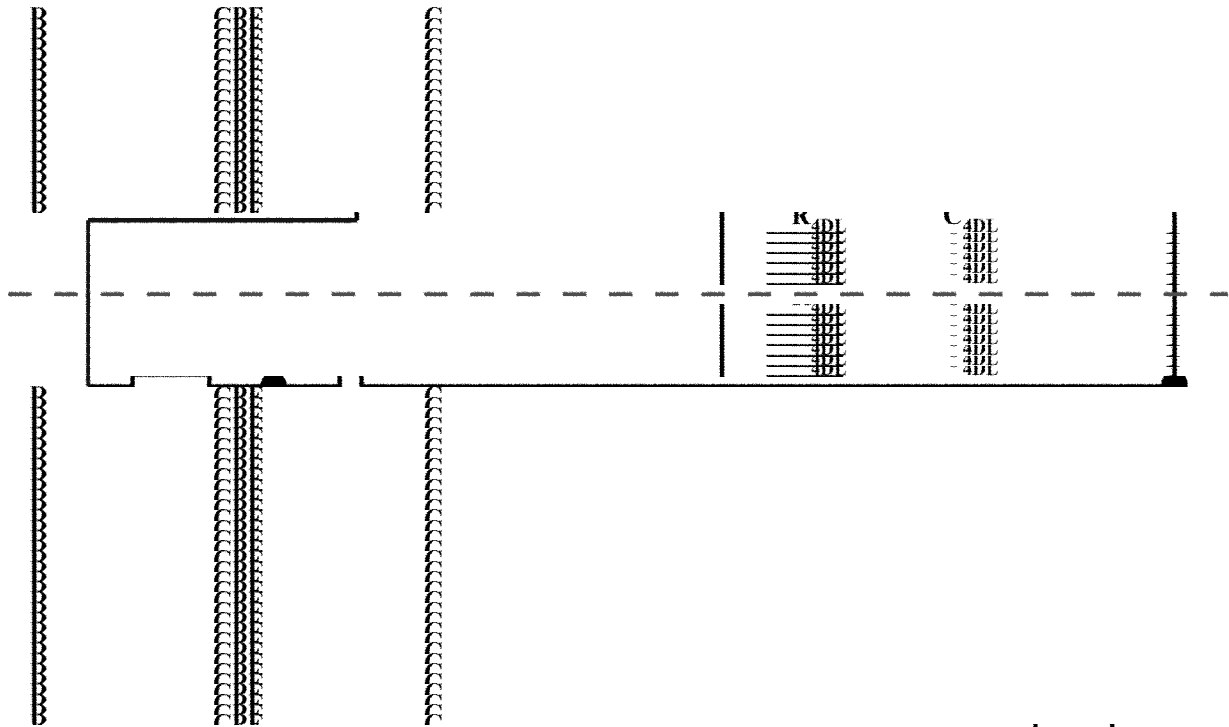


Рисунок 2 - ЕЕС для суперконденсатора з врахуванням псевдоємності.

Представлена еквівалентна схема дозволяє описати процес заряду пористої структури в обох режимах роботи пристрою, а також в умовах переходу між ними. Основною перевагою даної ЕЕС є можливість за її допомогою оцінювати вклад псевдоємності в загальну ємність електроду.

1. В.Е. Conway, *Electrochemical supercapacitors – scientific fundamentals and technological applications* (The Kluwer Academic/Plenum, New York, 1999).
2. Ю.М. Вольфович, Т.М. Сердюк, *Электрохимия* **38**, 1043 (2002).
3. Xiaorong Liu, P.G. Pickup, *J. of Power Sources* **176**, 410 (2008).
4. А.И. Беляков, *3й Европейский ежегодный симпозиум по суперконденсаторам и их применениям (ESSCAP08)* (Рим, Италия, 6-7 ноября, 2008 г.).
5. B.L.V. Prasad, H. Sato, T. Enoki *et al*, *Phys. Rev. B* **64**, 235407 (2001).
6. T. Enoki, *J. Phys. Chem. Solids* **65**, 103 (2004).
7. В.Р. Bakhmatyuk, В.Ya. Venhryn, I.I. Grygorchak, M.M. Micov, *J. of Power Sources* **180**, 890 (2008).
8. В.Е. Conway, H. Andreas, W.G. Pell, *Proc. 14-th international seminar on double layer capacitor and hybrid energy storage devices* (Deerfield Beach, USA, 2004), p.155.
9. J.R. Macdonald, G.B. Cook, *J. Electroanal. Chem.* **193**, 57 (1985).

УДК 621.315.562

Т.М. Біщанюк, О.В. Балабан, І.І. Григорчак
*Національний університет "Львівська політехніка",
м. Львів, Україна*

ФОРМУВАННЯ ТА ВЛАСТИВОСТІ ІНТЕРКАЛАТКНИХ НАНОСТРУКТУР КОНФІГУРАЦІЇ НЕОРГАНІЧНИЙ НАПІВПРОВІДНИК/СЕГНЕТОЕЛЕКТРИЧНИЙ РІДКИЙ КРИСТАЛ

Принципові суперечності між функціональними можливостями традиційних наноматеріалів і наноструктур на їхній основі та бурхливим розвитком наноінженерії (квантова когерентна спінтроніка, нанофотоніка), а також сучасними задачами автономної енергетики (створення надвисокоємких наногенераторів та іоністорів) привертають все більшу увагу до супрамолекулярних структур як об'єктів з якими часто пов'язують можливість реалізації унікальних фізико-хімічних властивостей, почасти - парадоксальних. Власне один із їх різновидностей вирізняє новий принцип організації речовини - клатратний. Вагомим кроком в розвиненні даного напрямку досліджень може послужити запропонована нами інтеркаляційна концепція формування супрамолекулярних ансамблів, що, як очікується, дасть змогу розширити варіабельність їхніх архітектур.

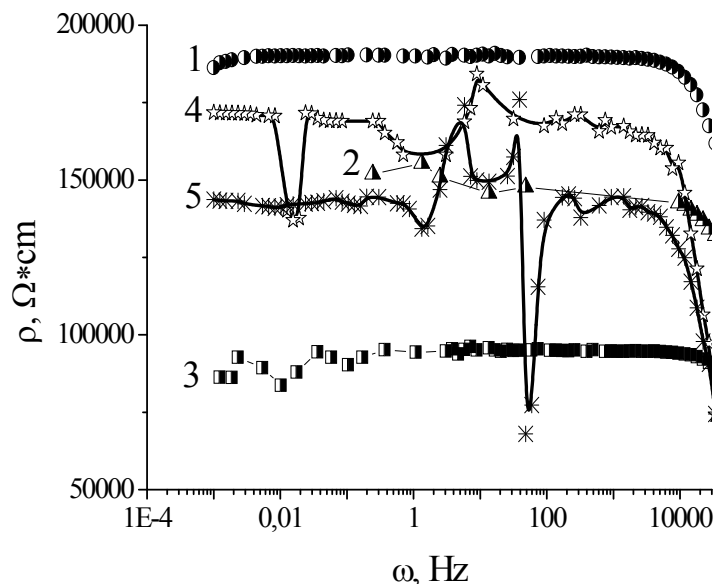


Рисунок 1 - Частотні залежності реальної складової комплексного питомого імпедансу, перпендикулярного до шарів наноструктури GaSe<segnRK>, виміряні без прикладання напруги зміщення (1), при напрузі зміщення $U=1$ В (2), після ультразвукового опромінення при напрузі зміщення $U=1$ В (3), а також при температурах 310 К (4) та 320 К (5) без напруги зміщення

З цією метою в даній роботі була сформована наноструктура неорганічний напівпровідник GaSe <сегнетоелектричний рідкий кристал>. Впровадження сегнетоелектричного рідкого кристалу (segnRK) між шари GaSe проводилось із застосуванням тристадійної схеми “кристалоінженерії”. На першій стадії у вихідну матрицю впроваджували нітрит натрію при температурі 300°C впродовж 5÷10 хвилин. На другій стадії відбувалась деінтеркаляція нітриту натрію з кристалу шляхом його екстрагування впродовж п'ятикратного 24-годинного циклу та

висушування при температурі 110°C і пониженому тиску. На завершальній

стадії проводили інтеркаляцію сегнетоелектричного рідкого кристалу в розширену кристалічну ґратку протягом 2 годин при температурі 80°C. Після цього його піддавали впливу ультразвуку протягом 5хв та 15 хв при постійній частоті 20 кГц.

На рис. 1 наведені частотні залежності дійсної складової питомого імпедансу, перпендикулярного до площин нанопрошарків $GaSe<segnRK>$ ($\rho(\omega)$), при різних температурах, значеннях прикладеної постійної напруги зміщення вздовж кристалографічної осі C а також після ультразвукового опромінення. Видно, що при кімнатній температурі $\rho(\omega)$ веде себе звиклим чином: низькочастотна вітка переходять у низпадаючу при високих частотах за рахунок вкладу перескокової провідності по локалізованих станах поблизу рівня Фермі, або процесів збудження – захоплення їх у хвосту зон чи в зони делокалізованих станів. Однак, підвищення температури викликає неординарну поведінку дійсної складової питомого імпедансу - сильні деформації її низькочастотної вітки з одночасним зменшенням за абсолютним значенням.

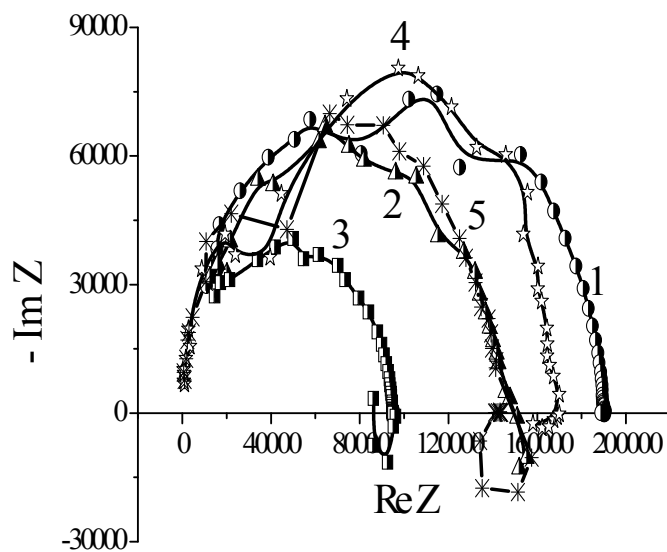


Рисунок 2 - Діаграми Найквіста для напрямку, перпендикулярного до шарів наноструктури $GaSe<segnRK>$, виміряні без прикладання напруги зміщення (1), при напрузі зміщення $U=1$ В (2), після ультразвукового опромінення при напрузі зміщення $U=1$ В (3), а також при температурах 310 К (4) та 320 К (5) без напруги зміщення

$GaSe<segnRK>$ низькочастотна вітка діаграми Найквіста – побудованої у означеній площині залежності уявної частини повного імпедансу від його реальної частини, переходить у IV- «індуктивний» квадрант комплексної площини. Водночас характер годографів імпедансу відображає процеси перенесення заряду відповідно через прошарки матриці, сегнетоелектричного кристалу та міжфазну межу між ними. В роботі розглядається природа

Деформуюча спектр $\rho_{\perp}(\omega)$ дія підвищеного температурного поля, як і акустичної хвилі пояснюється появою індуктивного відгуку при дії зазначених чинників. Наявність елемента індуктивності у побудованій відповідній заступній електричній схемі при певних співвідношеннях значень її параметрів може візуалізувати індуктивний відгук системи, або прояв так званого явища «від’ємної» ємності. Підтвердження цього отримуємо при відображенні повного імпедансу в комплексній площині з координатними осями його дійсної і уявної частин - $ReZ - ImZ$ (рис. 2). Видно, що при підвищенні температури та після ультразвукового опромінення

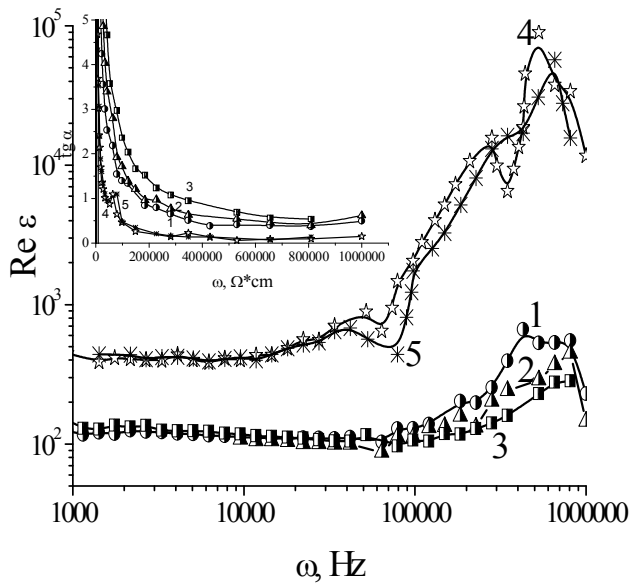


Рисунок 3 - Частотні залежності реальної складової діелектричної проникності, перпендикулярної до шарів наноструктури GaSe<segnRK>, виміряні без прикладання напруги зміщення (1), при напрузі зміщення $U=1$ В (2), після ультразвукового опромінення при напрузі зміщення $U=1$ В (3), а також при температурах 310 К (4) та 320 К (5) без напруги зміщення. На вставці – відповідні криві для тангенса кута електричних втрат

частотний діапазон $10^5 \div 10^6$ Гц, в якому діелектрична проникність сягає гігантських значень при низьких (<1) величинах тангенса кута електричних втрат. Механізми, які спричиняються до цього можуть бути застосовані до створення квантових конденсаторів – новітньої альтернативи хімічним джерелам струму. У всякому разі незаперечним є позитивний практичний аспект для технології радіочастотних конденсаторів – поєднання високого значення діелектричної провідності з низьким значенням тангенса кута втрат у радіочастотному діапазоні.

виникнення явища «від’ємної» ємності з позицій інжекції і утримання носіїв заряду в шарах надмалих розмірів, тобто, діапазону декількох нанометрів, а також пропонується модель, яка здатна пояснити спостережуваний факт сильнішого впливу на процес струмопроходження в GaSe<segnRK> ультразвукового опромінення, ніж підвищення температури на 25°C .

Цікавим є те, що на відміну від струмопроходження ультразвукове опромінення слабо міняє поляризаційні процеси (рис. 3). Натомість підвищення температури лише на 15°C значно підвищує діелектричну проникність, перпендикулярну до нанопрошарків. Особливу зацікавленість з практичної точки зору приковує до себе

УДК 537.8

Д.Б. Куриляк, О.М. Шарабура

Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка НАН України,
 м. Львів, Україна

ВПЛИВ КРАЇВ ДІАФРАГМИ НА БЛИЖНЄ ПОЛЕ КОНІЧНОГО ЗОНДА ЗА ОСЕСИМЕТРИЧНОГО ЗБУДЖЕННЯ

Для вдосконалення засобів дослідження нанорозмірних об'єктів використовують мікроскопію, що базується на аналізі ближнього електромагнітного поля оптичного діапазону в діафрагмі малого розміру. Тоді роздільна здатність діагностичної системи визначається її розміром і дозволяє ідентифікувати об'єкти суттєво менші за довжину зондувальної хвилі [1,2].

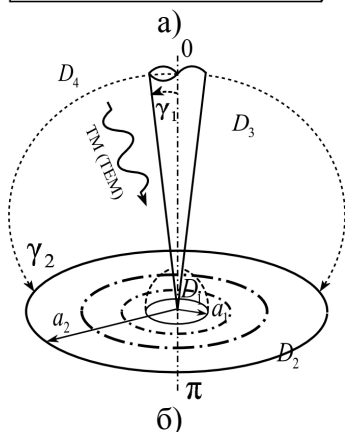
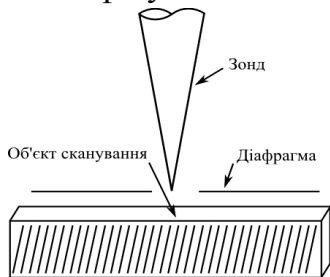


Рисунок 1 -

Геометрична схема: а) сканування, б) математичної моделі.

Для моделювання впливу розміру апертури та зонда на поведінку ближнього поля, запропоновано використати біконічну структуру одне плече якої – безмежний конус, а друге – скінченний конус із зрізаною вершиною і кутом розхилу 90° (рис. 1).

Відповідна електродинамічна задача розв'язана методом частинних областей із застосуванням процедури аналітичної регуляризації [3,4], що дозволяє знаходити поле у довільній точці простору з заданою точністю. Залежність поля від часу приймаємо у вигляді $e^{-i\omega t}$.

Нехай у сферичній системі координат (r, θ, φ) задано ідеально провідний біконус $Q=Q_1 \cup Q_2$, де

$$Q_1 : \{r \in (0, \infty), \theta = \gamma_1, \varphi \in [0, 2\pi)\}, \quad Q_2 : \{r \in (a_1, a_2), \theta = \gamma_2; \varphi \in [0, 2\pi)\}.$$

Біконус Q збуджується осесиметрично власною модою. Відповідне електромагнітне поле має відмінні від нуля компоненти $(E_r, E_\theta, H_\varphi)$. Магнітну компоненту падаючого поля подамо так

$$H_\varphi^i(r, \theta) = \frac{i\omega \varepsilon \Psi_{\nu_p-1/2}(\cos\theta) \Psi_{\nu_p-1/2}(\cos\theta_0)}{\sqrt{sr sr_0}} \begin{cases} K_{\nu_p}(sr) I_{\nu_p}(sr_0), & r \geq r_0 \\ I_{\nu_p}(sr) K_{\nu_p}(sr_0), & r \leq r_0 \end{cases} \quad (1)$$

Тут r_0, θ_0 – координати джерела, $r_0 \in (a_1, a_2)$, $\theta_0 \in (\gamma_1, \gamma_2)$; $\Psi_{\nu_p-1/2}(\cos\theta) = 1/\sin\theta$, коли $p=1$ та $\Psi_{\nu_p-1/2}(\cos\theta) = \partial/\partial\theta[R_{\nu_p-1/2}(\cos\theta)]$, коли $p>1$;

$$R_{\nu_p-1/2}(\cos\theta) = P_{\nu_p-1/2}(\cos\theta) P_{\nu_p-1/2}(-\cos\gamma_1) - P_{\nu_p-1/2}(-\cos\theta) P_{\nu_p-1/2}(\cos\gamma_1),$$

$P_{\nu_p-1/2}(\cos\theta)$ – функція Лежандра, $I_\nu(sr)$, $K_\nu(sr)$ відповідно модифікована функція Бесселя та функція Макдональда, $s = -ik$ ($k = k' + ik'' = \omega\sqrt{\varepsilon\mu}$, $k', k'' > 0$); ν_p – дійсний додатній корінь рівняння $R_{\nu_p-1/2}(\cos\gamma_2) = 0$, $\nu_1 = 1/2$ ($\nu_p \neq p+1/2$, $p=1, 2, 3, \dots$).

Електромагнітне поле, збуджуване (1), виражаємо через скалярний потенціал Дебая у вигляді:

$$E_r = -\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial U}{\partial \theta}), E_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r \partial \theta} (rU), H_\varphi = i\omega \varepsilon \frac{\partial U}{\partial \theta}. \quad (2)$$

З урахуванням співвідношень (2) відповідна електродинамічна задача зводиться до розв’язання крайової задачі для рівняння Гельмгольца

$$\Delta U + k^2 U = 0, \quad (3)$$

з граничною умовою на \mathbf{Q} , умовою випромінювання, та умовою обмеження енергії електромагнітного поля у будь якому скінченному об’ємі. Тут $U(r, \theta)$ – невідомий потенціал дифрагованого поля. Для рішення задачі виділимо підобласті:

$$D_1 : \{r \in [0, a_1), \theta \in (\gamma_1, \pi]; \varphi \in [0, 2\pi)\}, \quad D_2 : \{r \in (a_1, a_2), \theta \in (\gamma_2, \pi]; \varphi \in [0, 2\pi)\}, \quad (4)$$

$$D_3 : \{r \in (a_1, a_2), \theta \in (\gamma_1, \gamma_2); \varphi \in [0, 2\pi)\}, \quad D_4 : \{r \in (a_2, \infty), \theta \in (\gamma_1, \pi]; \varphi \in [0, 2\pi)\}.$$

У кожній з областей (4) магнітну компоненту дифрагованого поля подамо рядами у вигляді [5]:

$$H_\varphi(r, \theta) = \begin{cases} \frac{i\omega \varepsilon}{\sqrt{sr}} \sum_{n=1}^{\infty} x_n^{(1;1)} \frac{\partial}{\partial \theta} P_{z_n-1/2}(-\cos \theta) \frac{I_{z_n}(sr)}{I_{z_n}(sa_1)}, & (r, \theta) \in D_1 \\ \frac{i\omega \varepsilon}{\sqrt{sr}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial \theta} P_{\mu_n-1/2}(-\cos \theta) \left[x_n^{(2;1)} \frac{K_{\mu_n}(sr)}{K_{\mu_n}(sa_1)} + x_n^{(2;2)} \frac{I_{\mu_n}(sr)}{I_{\mu_n}(sa_2)} \right], & (r, \theta) \in D_2 \\ H_\varphi^i(r, \theta) + \frac{i\omega \varepsilon}{\sqrt{sr}} \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_{v_n-1/2}(\cos \theta) \left[x_n^{(3;1)} \frac{K_{v_n}(sr)}{K_{v_n}(sa_1)} + x_n^{(3;2)} \frac{I_{v_n}(sr)}{I_{v_n}(sa_2)} \right], & (r, \theta) \in D_3 \\ \frac{i\omega \varepsilon}{\sqrt{sr}} \sum_{n=1}^{\infty} x_n^{(4;1)} \frac{\partial}{\partial \theta} P_{z_n-1/2}(-\cos \theta) \frac{K_{z_n}(sr)}{K_{z_n}(sa_2)}. & (r, \theta) \in D_4 \end{cases} \quad (5)$$

Тут $x_n^{(1;1)}, x_n^{(2;1)}, x_n^{(2;2)}, x_n^{(3;1)}, x_n^{(3;2)}, x_n^{(4;1)}$ – невідомі коефіцієнти розкладу; $\{z_n\}_{n=1}^{\infty}, \{\mu_n\}_{n=1}^{\infty}, \{v_n\}_{n=1}^{\infty}$ – зростаючі послідовності додатних коренів рівнянь $P_{z_n-1/2}(-\cos \gamma_1) = 0, P_{\mu_n-1/2}(-\cos \gamma_2) = 0, R_{v_n-1/2}(\cos \gamma_2) = 0$.

Використовуючи методи спряження полів та аналітичної регуляризації, задачу зводимо до розв’язання нескінченної системи лінійних алгебраїчних рівнянь (НСЛАР) другого роду, яку записуємо так

$$\begin{cases} X - A^{-1}(A - A_{11})X + A^{-1}A_{12}Y = A^{-1}F_1, \\ Y - A^{-1}(A - A_{22})Y + A^{-1}A_{21}X = A^{-1}F_2. \end{cases} \quad (6)$$

Тут $X = \{x_n\}_{n=1}^{\infty}, Y = \{y_n\}_{n=1}^{\infty}$ – невідомі вектори, $x_n = q(z_n, \gamma_2)x_n^{(1;1)}, y_n = q(z_n, \gamma_2)x_n^{(4;1)}, q(z_n, \gamma_2) = (z_n^2 - 0.25)P_{z_n-1.2}(-\cos \gamma_2), A_{11}, A_{12}, A_{21}, A_{22}$ – нескінченні матриці з елементами

$$a_{jn}^{(11)} = \frac{sa_1 W[K_{\xi_j} I_{z_n}]_{sa_1}}{\Delta_{jn} I_{z_n}(sa_1) K_{\xi_j}(sa_1)}, \quad a_{jn}^{(12)} = \frac{sa_2 W[K_{z_n} K_{\xi_j}]_{sa_2}}{\Delta_{jn} K_{z_n}(sa_2) K_{\xi_j}(sa_1)},$$

$$a_{jn}^{(21)} = \frac{sa_1 W[I_{\xi_j} I_{z_n}]_{sa_1}}{\Delta_{jn} I_{\xi_j}(sa_2) I_{z_n}(sa_1)}, \quad a_{jn}^{(22)} = \frac{sa_2 W[K_{z_n} I_{\xi_j}]_{sa_2}}{\Delta_{jn} I_{\xi_j}(sa_2) K_{z_n}(sa_2)},$$
(7)

$F_1 = \{f_j^{(1)}\}_{j=1}^\infty$, $F_2 = \{f_j^{(2)}\}_{j=1}^\infty$ – відомі вектори; $\Delta_{jn} = \xi_j^2 - z_n^2$, $\{\xi_n\}_{n=1}^\infty = \{\nu_n\}_{n=1}^\infty \cup \{\mu_n\}_{n=1}^\infty$ – зростаюча послідовність. Матричні елементи регуляризуючих операторів A , A^{-1} задаються формулами [4].

Розв’язок НСЛАР (6) можна отримати з заданою точністю для довільних геометричних розмірів системи та частотного параметра у класі послідовностей $x_n, y_n = O(n^{-1/2})$, коли $n \rightarrow \infty$, що забезпечує виконання усіх необхідних умов, включаючи умови Мейкснера на краях розсіювача.

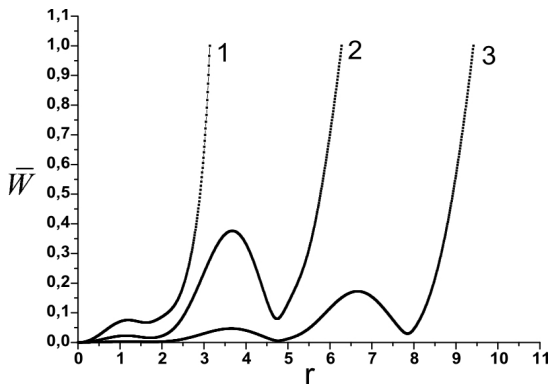


Рисунок 2 - Розподіл поля в діафрагмі,
 $\theta = \pi/2$; $a_1 = 316 \text{ nm}$ (1),
 $a_1 = 632 \text{ nm}$ (2), $a_1 = 949 \text{ nm}$ (3)

Систему рівнянь (6) використали для дослідження особливостей формування ближнього поля у діафрагмі з отвором за наявності зонда (див. рис. 1). Наведені тут характеристики поля обчислювались за таких значень параметрів біконуса: $\gamma_1 = 5^\circ$, $\gamma_2 = 89.99^\circ$, $a_1 = 316; 632; 949 \text{ nm}$, $a_2 = 1511 \text{ nm}$. Біконус опромінювався електромагнітною хвилею, що відповідає довжині хвилі гелій-неонового лазера $\lambda = 632,8 \text{ nm}$. Дослідили ефект проникнення поля в малий отвір на диску за збудження ТЕМ-

модю ($\nu_1 = 0.5$). На рис. 2 показані нормовані залежності $\bar{W} = (E_r^2 + E_\theta^2)r^2 \sin \theta$ як функції радіальної координати r , при $\theta = \pi/2$ і різних значеннях радіусу діафрагми a_1 .

1. E.A.Ash, G. Nichols, Nature **237**, 510 (1972).
2. E. Betzig, A. Lewis, A. Harootunian, M. Isaacson, E. Kratschmer, Biophys. J. **49**, 269 (1986).
3. D.B. Kuryliak, Z.T. Nazarchuk, Radio science **43**, RS4S03 (2008).
4. Д.Б. Куриляк, З.Т. Назарчук, “Аналітико-числові методи в теорії дифракції хвиль на кінцевих і клиноподібних поверхнях” (Наук. думка, Київ, 2006).
5. D.B. Kuryliak, O.M. Sharabura, Proc. International Conf. on Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (Kharkiv, Ukraine, 2012) 427.

Дмитро Кардашев¹, Костянтин Кардашев²
¹Одеська національна морська академія,
²Одеська національна академія зв'язку ім. О.С. Попова,
м. Одеса, Україна

ЛОКАЛЬНА ГУСТИНА ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ ГРАФЕНУ

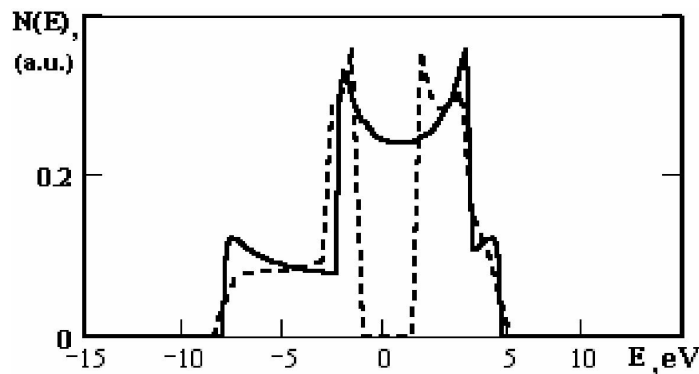
Графен є двовимірним кристалом, який складається з одиночного шару атомів вуглецю, зібраних в гексагональну ґратку, та є перспективним матеріалом для потреб сучасної електроніки.

Електронна енергетична структура матеріалу знаходить віддзеркалення у багатьох його фізичних властивостях. Зонна структура графену розрахована в роботі [1] у наближенні сильно зв'язаних електронів.

Для визначення локальної густини електронних станів в гексагональному моношарі ми скористалися методом функцій Гріна з напівемпіричним одноелектронним гамільтоніаном сильного зв'язку, заданим в базисі однієї s - та двох px , py -атомних орбіталей. Структура графену моделювалася ґраткою Бете, яка зберігає гексагональне розташування сусідніх атомів.

Функцію Гріна для i -го вузла можна обчислити, використовуючи рівняння Дайсона (підсумовування проводиться по найближчих сусідах)

$$(E I_{ii} - H_{ii}) G_{ij} = I_{ij} + \sum_{k=1}^3 H_{ik} G_{kj} .$$



На рисунку наведені розраховані аналітично локальні густини електронних станів (уявні частини функцій Гріна) гексагонального моношару (суцільна лінія) та тетраедрично-координованої структури [2] (пунктир). Можна бачити, що енергетичний спектр гексагональної структури, у відмінності від алмазоподібної, не має забороненої зони, тобто графен має провідність металевого типу.

1. K.S. Novoselov *et al*, Science **306**, 666 (2004).
2. Д.Л. Кардашев, Фізика і хімія твердого тіла **4**, 643 (2001).

УДК 578.32, 535.34, 535.37

**Владислав Кравченко¹, Катерина Могильчак¹, Юрій Рудь²,
Леонід Буцацький², Валерій Ящук¹**

¹Фізичний факультет, Київський національний університет імені Тараса Шевченка,

²Інститут біології, Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
м. Київ, Україна

СПЕКТРАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ ІРИДОВІРУСУ КОМАРА, ЙОГО КАПСИДНИХ БІЛКІВ, ЛІПІДІВ ТА ДНК

Іридовірус комара (*Mosquito iridescent virus*, MIV) – це великий ікосаедричний ліпидовмісний вірус, який уражає комарів родів *Aedes*, *Culex*, *Culizeta*, а також деякі види прісноводних риб і тому може завдавати значних збитків промисловому рибництву. Віріон MIV складається з ядра, що містить у собі двонитчасту вірусну ДНК, оточеного капсидом (білковою оболонкою ікосаедричної форми), вкритим, у свою чергу, зовнішньою ліпідною оболонкою.

Метою роботи було виявлення кореляції між спектральними властивостями цілого віріона та його складовими (білками капсидної оболонки, вірусною ДНК та ліпідами), а також між спектральними властивостями капсидних білків та ароматичних амінокислот (триптофану, тирозину та фенілаланіну), які входять до їх складу і, як відомо, є центрами інтенсивного оптичного поглинання та флюоресценції в УФ та видимій областях спектра ($\lambda > 200$ нм).

Експериментально виміряно спектри поглинання, флюоресценції та збудження флюоресценції цілих віріонів MIV, їх капсидних білків, ліпідів та вірусної ДНК, розчинених в буферах TRIS-HCl, TRIS-HCl-EDTA, діоксані та дистильованій воді відповідно, а також усіх трьох ароматичних амінокислот, розчинених у дистильованій воді. За допомогою програмних пакетів HyperChem 8 та Gaussian 03 проведено квантово-хімічні розрахунки електронно-коливальних спектрів окремих амінокислот та їх послідовностей (фрагментів білкових молекул).

Зроблено висновок про те, що оптичне поглинання віріонів MIV зумовлене адитивними внесками усіх складових віріона (капсидних білків, вірусної ДНК та ліпідів), проте поглинання й флюоресценція капсидних білків не можуть бути описані адитивними внесками окремих ароматичних амінокислот. Останнє може вказувати на взаємодію між π -електронвмісними центрами випромінювання цих амінокислот в білкових макромолекулах. Відмінності, виявлені між експериментально виміряними та розрахованими спектрами нативних капсидних білків та окремих амінокислот та їх послідовностей, можуть бути зумовлені залежністю спектрів білкових макромолекул від їх конформації в даному розчині й при даній температурі. Для з'ясування цього питання необхідне проведення подальших експериментальних досліджень денатурованих капсидних білків іридовірусу.

УДК 631.815.592

Володимир Литовченко

*Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України,
м. Київ, Україна*

СОНЯЧНА ЕНЕРГЕТИКА: ДОСЯГНЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ

В сучасних умовах інтенсивного розвитку промислового виробництва різко зростає енергоспоживання, досягнувши величин, що є на межі екологічної рівноваги. Особливо серйозну проблему складають зростаючі потреби важкої індустрії, які в основному живляться від теплогенеруючих джерел енергії. Вже зараз об'єм таких джерел складає декілька сотих відсотків від падаючої на землю енергії сонячних променів, а це близько до межі екологічної безпеки. До того ж обмеженим є запас енергії всіх відомих корисних копалин ($5 \cdot 10^{22}$ Дж). Тому пошук альтернативних джерел електричної енергії є надзвичайно актуальним і важливим [1].

Серед найбільш перспективних напрямків в цьому відношенні є спосіб прямого перетворення «безпровідної» променевої енергії, що в великому об'ємі ($3 \cdot 10^{24}$ Дж/год) надходить нам від сонця. Такими системами, запропонованими ще більш ніж 50 років тому, є напівпровідникові фото чутливі прилади з внутрішніми електричними бар'єрами, що формують направлений електричний струм створених опромінюючим світлом вільних заряджених частинок-електронів чи дірок..

Прогрес у розробці та ринковому постачанні цих сонячних ФЕП (фотоелектричних електронних перетворювачів) настільки вражаючий, що за 10 років їх випуск зріс більш, ніж в 10 разів. В представленому матеріалі проаналізовані найбільш поширені типи фотоперетворювачів, сучасні домінуючі матеріали, технології та конструкції, досягнення по ціні енергії та ефективності перетворення, а також новітні методи фото перетворення та перспективні шляхи розвитку відтворюваної сонячної енергетики.

1. В.Мачулін, В.Литовченко, М.Стріха, Вісник Національної академії наук України **5**, 30 (2011).

УДК 001.32:537.311.322

Василь Шендеровський
*Інститут фізики НАН України,
м. Київ, Україна*

ДЕЯКІ АСПЕКТИ З ІСТОРІЇ СТАНОВЛЕННЯ ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ В УКРАЇНІ

Фізика як наука точного природознавства проявилася з кінця XVII та проходила період становлення до початку XX століть. У її складі виділилася фізика діелектриків, провідників та напівпровідників. Становленню фізики діелектриків та напівпровідників на Україні сприяло виникнення мережі університетських закладів (1805-1865) та спеціальних освітніх інститутів (1885-1898). Зауважимо, що дослідження у області експериментальної фізики заснував М. П. Авенаріус з 1874р. в Імператорському Київському університеті ім. Святого Володимира (ІКУ СВ) та дослідив явище термо-е.р.с. контакту метал-метал. Згодом, М. М. Шіллер, Г. Г. Де-Метц, П. О. Зілов, Й. Й. Косоногов та інші розробляли методи дослідження фізики діелектриків (1875-1901). На їх основі Й. Й. Косоногов провів ґрунтовне дослідження оптичного резонансу, зумовлене мікроструктурою шару речовини (1901-1903) і виміряв діелектричну проникливість ряду неполярних рідин (1905-1911). Потім, О. Г. Гольдман на основі оптичного резонансу досліджує фотоелектричні властивості, явище і теорію ефекту Беккереля, вентильні і фотографічні ефекти в електролітах (1908-1911) та ін.

Коли творилася історія української державності, епізодичні дослідження фотоелектричного ефекту на поверхні діелектриків, електролітів та інше проводили О. Г. Гольдман, С. І. Каляндник, П. С. Тартаковський, П. Г. Лапинський, В. О. Плотніков. Крім того, вагомі ініціативи науково-організаційні проявив Й. Й. Косоногов під час заснування Української академії наук (УАН) у спроможності "Про створення Київського Державного фізичного дослідного інституту". Зокрема, О. Г. Гольдман, який у 1921-1929 рр. очолював Київську НДК фізики (КНДКФ) НКО УСРР та провів перші систематичні дослідження фізики діелектриків і напівпровідників. Крім того, був ініціатором створення Української асоціації фізиків (УАФ), яка створила передумови для об'єднання фізиків у мережі науково-дослідних інститутів (НДІ) НКО УСРР і відповідно фізики напівпровідників у 1926-1930 рр. Зазначимо, що з 1929 р. на базі КНДКФ НКО УСРР створюється Науково-дослідний інститут фізики у Києві НКО УСРР – Інститут фізики (ІФ) АН УРСР, який очолював О. Г. Гольдман з 1929 по 1938 рр.

Зокрема, в ІФ АН УРСР з 1929 по 1960 рр. відбулося становлення фізики напівпровідників і діелектриків із проявленням ряду етапів на чолі із академіком ІФ АН УРСР О. Г. Гольдманом, працями В. К. Бернацького, П. Г. Борзяка, Л. П. Лукашевича, О. Г. Миселюка, Г. А. Федоруса, В. І. Ляшенка, С. О. Березюк, Д. С. Гейхман, О. М. Косоногової та інших – виконані піонерські роботи із досліджень вентильного і фотогальванічного ефекту, інші властивості

купроксних фотоелементів, що заклали основи їх технічного застосування як трансформаторів сонячної енергії. У структурі ІФ АН УРСР В. Є. Лашкарьов, академік АН УРСР з 1945 р., вперше заснував: відділ напівпровідників ІФ АН УРСР; спеціалізацію напівпровідники та діелектрики, і відповідний випуск та кафедру фізики напівпровідників Київського державного університету ім. Т. Г. Шевченка (КДУ ТГШ). Праці О. Г. Гольдмана, В. Є. Лашкарьова, С. І. Пекаря, В. І. Ляшенка, П. Г. Борзяка, М. Ф. Дейгена, І. Д. Конозенка та інших заклали основу науковим напрямкам: фотоелектричних явищ екситонів і поляронів, поверхні та електроніки напівпровідників і введення напівпровідникових матеріалів.

У 1960 році був заснований Інститут напівпровідників (ІН) АН УРСР. Перші 116 співробітників із ІФ АН УРСР ввійшли до складу ІН АН УРСР, з яких: В. Є. Лашкарьов, С. І. Пекар, В. І. Ляшенко, П. Г. Борзяк, В. М. Бурмистров, Ю. І. Горкун, М. Ф. Дейген І. Д. Конозенко, В. Е. Косенко, Т. І. Кучер, І. Б. Мізецька, О. Г. Міселюк, Е. І. Рабша, О. В. Снітко, І. І. Степко, В. І. Уст'янов, Г. А. Федоус, О. В. Фіалковська та 26 молодших співробітників і інженерів заклали основи фізики і техніки напівпровідників. Першим директором ІН АН УРСР з 1960 по 1970 рр. був В. Є. Лашкарьов. За цей період часу інститут став центром фундаментальних досліджень - теорії напівпровідників, фізики фотоелектричних та поверхневих явищ у напівпровідниках. Там же, розпочали формуватися наукові школи. З 1970 р. по 1990 р. інститут очолював академік АН УРСР з 1985 р., О. В. Снітко. За його керівництвом, інститут перетворився від наукового до науково-технічного провідного фундаментального закладу Потім його очолював у 1991-2003 рр. академік АН УРСР з 1988 р. С. В. Свечніков. У 1992 р. заклад був перейменований на Інститут фізики напівпровідників (ІФН) Національної АН України. З 2003 р. закладу присвоєно ім'я В. Є. Лашкарьова – ІФН Л НАНУ, АН України, який з того часу очолює академік В. Ф. Мачулін. Сьогодні в ІФН Л НАНУ зберігають наукові напрямки: фізики процесів взаємодії електромагнітного випромінювання з речовиною; фізики низьковимірних систем, мікроелектроніки і наноелектроніки; оптоелектроніки та сонячної енергетики; фізичних і технологічних проблем матеріалів сенсорної, інфрачервоної та НВЧ – техніки. Тепер за вище означеними напрямками діяльності склалися і успішно функціонують під керівництвом провідних вчених НАНУ широко відомі наукові школи: школа академіка В. Є. Лашкарьова з фізики напівпровідників; школа академіка С. І. Пекаря з теорії твердого тіла (тепер В. О. Кочелап); школа академіка О. В. Снітка та професора В. І. Ляшенка з фізики поверхні (тепер – В. Г. Литовченко).

УДК 537.311.322(063), 001:001.8.62

Богдан Кожушко, Василь Шендеровський

*Інститут фізики НАН України,
м. Київ, Україна*

НАРОДЖЕНИЙ ЧЕРНІГІВСЬКОЮ ЗЕМЛЕЮ (ДО 150-РІЧЧЯ ВІД ДНЯ НАРОДЖЕННЯ ВИДАТНОГО ВЧЕНОГО-КРИСТАЛОФІЗИКА ГЕОРГІЯ ВУЛЬФА)

Серед багатьох наших земляків, які прославили Україну у світовому вимірі, був уродженець Чернігово-Сіверського краю Георгій Вікторович Вульф.

Він народився 10 червня 1865 року у м. Ніжині у інтелігентній сім'ї: батько майбутнього вченого був викладачем, директором гімназій у Ніжині, Чернігові та Варшаві; мати, як недавно вдалося встановити вченим, - Лідія Григорівна Гудима – належала до старовинного українського дворянського роду і була дочкою директора славної Чернігівської чоловічої гімназії.

Невдовзі після народження Григорій покинув рідну землю й провів дитинство та юність у Варшаві, де у 1880 році закінчив 6-ту гімназію – найкращу у тодішньому Царстві Польському. Того ж року вступив на природниче відділення фізико-математичного факультету Варшавського університету. Вже з II-го курсу здібний студент долучається до наукової діяльності: займається кристалографією у професора-мінералога О.С. Лагоріо і одночасно працює у фізичній лабораторії професора М.Г. Єгорова. На III-му курсі виконав експериментальну роботу, за яку на конкурсі отримав золоту медаль. За успіхи у навчанні після закінчення університету (1885) Вульфа залишили на кафедрі мінералогії для написання дисертаційної роботи.

Молодого науковця 1889 року відрядили до Мюнхена до патріарха європейської кристалографії – професора Пауля Грота, де Г. Вульф виконав основну частину магістерської дисертації. Згодом Вульф працює вже над проблемами удосконалення метрології в Паризькій лабораторії академіка Адьфреда Корню.

Після повернення з Європи молодий науковець на засіданні вченої ради Варшавського університету виголошує першу в Російській імперії доповідь із найсучаснішої тогочасної наукової тематики — рідкі кристали. Незабаром у фаховому журналі за авторством Вульфа з'явилася перша в історії наукова стаття російською мовою, яка поклала початок вивчення рідкокристалічної тематики у наукових і навчальних закладах Росії.

У 1896 році Г. Вульф не надовго повертається на рідну українську землю, щоби в Новоросійському університеті (м. Одеса) захистити докторську дисертацію, присвячену фізичним закономірностям процесу вирощування кристалів. Після успішного захисту займає професорську вакансію на кафедрі мінералогії та кристалографії Казанського університету, а через три семестри повертається до Варшави на посаду ординарного професора кафедри мінералогії у своїй alma mater.

Згодом Г. Вульф змушений був покинути Варшаву і переїхати на проживання до Москви. Тут він веде приват-доцентський курс на кафедрі мінералогії у професора В.І. Вернадського у Московському університеті та одночасно створює кристалографічну лабораторію в приватному Народному університеті імені А.Л. Шанявського. Від 1911 року Г. Вульф розпочинає перші в Росії дослідження кристалів за допомогою Х-променів (рентгенівських променів). До кінця життя цей науковий напрямок для Г. Вульфа залишався пріоритетним, і не випадково якраз у цій царині він досягнув світового визнання.

Г. Вульф проявив надзвичайний інтерес до теми дослідження структури кристалів, про що свідчить публікація ним тільки в 1913 році восьми наукових публікацій з питань інтерференції Х-променів у кристалах. У них Г. Вульф не тільки теоретично пояснив відбивання Х-променів від пластинок слюди, яке спостерігали також англійці Генрі та Лоуренс Брегги, та вивів формулу для розрахунку картинок Х-променевої дифракції, але й показав еквівалентність його формули і рівнянь, отриманих М.фон Лауе. Іншими словами, незалежно від батька та сина Бреггів (статті з друку вийшли майже одночасно) зовсім іншим шляхом Г. Вульф вивів формулу, яка описує кількісно явище дифракції Х-променів в кристалах або закон інтерференції Х-променів, відбитих атомними площинами кристалів. В історії науки цей закон відомий як «правило Вульфа-Бреггів» або «умова Вульфа-Бреггів». За це відкриття Бреггам була присуджена 1915 року Нобелівська премія з фізики, а наш вчений-співвітчизник залишився без нагороди.

Г. Вульф першим у світі зрозумів величезне практичне значення дифракції Х-променів як єдиного на той час методу прямого експериментального вивчення атомної будови кристалів. Формула, виведена Вульфом, стала основою для створення важливих сучасних науково-технічних напрямків: рентгенографії та рентгенівської топографії.

За особливі заслуги в галузі рентгеноструктурного аналізу Г. Вульфа у 1921 році обирають членом-кореспондентом Російської академії наук. Крім того, саме йому доручають керівництво Московським фізичним товариством, до якого входили тоді практично всі корифеї російської фізичної науки: Йоффе, Жуковський, Тімірязєв, Умов, Ландсберг, Вавилов, Тамм, Павлов, Мандельштам, Еренфест та інші.

Сфера наукових інтересів вченого була надзвичайно широкою: кристалографія, кристалофізика, кристалооптика, дифракція рентгенівських променів, рентгеноструктурний аналіз, мінералогія, фізика рідких кристалів тощо. До скарбниці світової науки ввійшли також відомі: „принцип Кюрі-Вульфа" та „сітка Вульфа".

Помер Георгій Вульф у Москві 25 грудня 1925 року, похований у місті Тарусі (Калінінська область).

На жаль, ім'я вченого в Україні майже забуто, хоча Георгія Вікторовича Вульфа можемо вважати вченим-фізиком українського походження, до того ж з глибокими українськими коренями.

УДК 546.48.24, 544.022.384.2

Ігор Горічок, Світлана Бардашевська

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

ТЕРМОДИНАМІКА ДЕФЕКТНИХ ПІДСИСТЕМ КРИСТАЛІВ СПОЛУК II-VI, IV-VI

Напівпровідникові кристали сполук групи II-VI і IV-VI є базовими матеріалами для створення широкого класу оптоелектронних приладових структур. Серед цих матеріалів особливу увагу привертають телуриди, зокрема кадмію та плюмбуму, що обумовлено як особливостями їх фізико-хімічних властивостей так і відносно нескладною і достатньо вивченою технологією синтезу. В останні роки перспективним напрямком дослідження вище згаданих матеріалів є квантоворозмірні гетероструктури $A^{IV}B^{VI}/A^{II}B^{VI}$ та термоелектричні матеріали на основі твердих розчинів $A^{II} - A^{IV} - B^{VI}$.

Незважаючи на значні успіхи досягнуті в цьому напрямку, ряд проблем, що стосуються кожного конкретного матеріалу зокрема, вимагають додаткових досліджень. В першу чергу це стосується визначення впливу технологічних параметрів двотемпературного відпалу матеріалів на формування їх дефектних підсистем, і впливу точкових дефектів на фізико-хімічні властивості халькогенідів [1-2]. Як свідчать результати експериментальних досліджень, зокрема ФЛ, КЛ, ЕПР, дефектна структура кристалів сполук II-VI і IV-VI є надзвичайно складною, і тільки в окремих випадках вдається інтерпретувати експериментальні дані використовуючи наближення одного домінуючого дефекту. Концентрації різних видів дефектів залежать один від одного, тому актуальною є проблема створення моделі точкових дефектів, яка дозволила б, з одного боку, виявити співвідношення, що існують між концентраціями дефектів, і з іншого - встановити якісну та кількісну залежність фізичних властивостей кристалів від концентрації дефектів.

Використовуючи метод, що базується на мінімізації термодинамічного потенціалу системи "кристал-пара" як функції концентрації дефектів, в даній роботі розраховані рівноважні концентрації точкових дефектів, вільних носіїв заряду і ступінь відхилення від стехіометрії CdTe, PbTe, SmS в залежності від технологічних факторів двотемпературного відпалу (температури відпалу T і тиску пари додаткового компонента P). Концентрації точкових дефектів безпосередньо визначали з системи рівнянь, що описують рівновагу двофазної двокомпонентної системи "кристал-пара":

$$\pm\mu_{D_i}^s = \mu_i^g,$$

де $\mu_{D_i}^s$ – хімічний потенціал дефекту i -го компонента ($i = A, B$), μ_i^g – хімічний потенціал i -го компонента в парі.

Хімічний потенціал газу:

$$\mu^g = kT \ln P + \mu_0, \quad \mu_0 = kT(-\ln(kT) + \ln(h^3 / (2\pi mkT)^{\frac{3}{2}})).$$

m - маса атома або молекули

Хімічний потенціал дефекту визначали шляхом диференціювання енергії Гіббса кристала по концентрації дефектів. Енергію Гіббса представляли у вигляді:

$$G = G_0 + \sum_i (E_i + F_{\text{vib},i}) [D_i] + nE_C - pE_V - T(S_n + S_p + S_k),$$

де G_0 – енергія Гіббса, що не залежить від наявності дефектів, E_i - енергія утворення дефекту, $F_{\text{vib},i}$ - вільна вібраційна енергія дефекту, $[D]$ - концентрації дефекту D , n і p - концентрації електронів і дірок, E_C , E_V - енергія дна зони провідності і стелі валентної зони, S_k - конфігураційна ентропія, S_n , S_p - ентропії електронів у зоні провідності і дірок у валентній зоні. Підсумовування ведеться по всіх підгратках і всіх дефектах в підгратці.

При розрахунку концентрацій дефектів в кадмій телуриді використовували модель, яка враховує практично всі можливі типи власних точкових дефектів: V_{Cd} , V_{Te} , Cd_i , Te_i , Cd_{Te} , Te_{Cd} , кожен з яких може знаходитися в трьох зарядових станах (нейтральний, однократно або двократно йонізований). Показано, що домінуючими донорнимм дефектами у матеріалі n-типу є двократно йонізовані міжвузлові атоми кадмію при $T > 870$ К, і двократно йонізовані вакансії телуру при $T < 870$ К. У матеріалі p-типу основним акцепторних дефектом до температур $T \approx 1100$ К є однократно йонізована вакансія кадмію, а при вищих температурах – однократно йонізований міжвузловий атом телуру. При цьому, в матеріалі, насиченому телуром, є великою є концентрація антиструктурних дефектів, більшість з яких знаходяться в нейонізованому стані.

Для плюмбум телуриду в моделі дефектної підсистеми врахована можливість утворення вакансій у аніонній та катіонній підгратках. Причому, вакансії плюмбуму можуть знаходитися у двох (однократно або двократно йонізована) а вакансії телуру в трьох (нейтральний, однократно або двократно йонізована) зарядових станах. Згідно проведеного розрахунку, в матеріалі насиченому плюмбумом домінуючими дефектами є двократно йонізовані вакансії телуру, а насиченому телуром - однократно та двократно йонізовані вакансії плюмбуму. При фіксованому значенні температури відпалу з ростом тиску пари телуру концентрація двократно заряджених вакансій свинцю зростає швидше ніж однократно заряджених вакансій, таким чином, що в околі n-p-переходу домінуючими є V_{Pb}^{2-} , а при максимальному тиску халькогену – V_{Pb}^- .

1. Д.М. Фреїк, І.В. Горічок, В.В. Прокопів (мол), Хімія металів і сплавів **4**, 223 (2011).
2. Д.М. Фреїк, І.В. Горічок, М.В. Шевчук, Л.В. Туровська, ФХТТ **12**, 378 (2011).
3. Д.М. Фреїк, І.В. Горічок, М.О. Шевчук, УХЖ **78**, 25 (2012).

УДК 621.315

Любомир Никируй, Роман Дзумедзей

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ЛЕГОВАНОГО ПЛЮМБУМУ ТЕЛУРИДУ ТА ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ НА ЙОГО ОСНОВІ

Проблема виробництва більш ефективних термоелектричних приладів була і залишається важливою і невідкладною проблемою в області фізики і технології напівпровідників. Вирішення даної проблеми безпосередньо залежить від процесу отримання термоелектричних матеріалів. Перспективи в цій області зазвичай пов'язують з створенням нових більш ефективних матеріалів. Проте, потрібно більш ретельно вивчити можливості уже існуючих матеріалів.

Ефективні термоелектричні матеріали повинні володіти високими значеннями електропровідності σ та коефіцієнта термо-е.р.с. α , а також низькі значення теплопровідності χ . У класичних матеріалах ріст σ супроводжується зниженням коефіцієнта термо-е.р.с. і збільшенням електронної теплопровідності $\chi_{ел}$, а ріст α – зниженням електропровідності відповідно.

У теперішній час плюмбум телурид і тверді розчини на його основі відносяться до числа перспективних матеріалів для виготовлення термоперетворювачів, що працюють в середньо температурному інтервалі.

Залежність кінетичних коефіцієнтів від концентрації вільних носіїв заряду дозволяє, провівши оптимізацію, досягнути максимуму термоелектричної добротності $Z = \alpha^2 \sigma / \chi$. Як правило оптимізацію проводять для кожного матеріалу віток термоелемента окремо, що забезпечує максимум добротності термоелемента загалом. Саме тому важливо вивчати вплив легування на кінетичні параметри матеріалу.

Введення домішки стибію і бісмуту робить можливим контроль концентрації електронів як у кристалах так і тонкоплівкових структурах PbTe для оптимізації на їх основі, параметрів перетворювачів термоелектричної енергії, n-p переходів для лазерних діодів, тощо. Крім того, домішки p'ятої групи періодичної таблиці надають кристалічному плюмбуму телуриду надзвичайно низької ґраткової складової теплопровідності $\chi_{гр}$. Зниження ґраткової теплопровідності в першу чергу пов'язано із присутністю в складі сполуки тяжких атомів, а також із значним ступенем розвпорядкування кристалічної ґратки за рахунок високої концентрації точкових дефектів.

Розрахунки електропровідності проводилися із використанням формули:

$$\sigma = \mu en, \quad (1)$$

де μ – рухливість, e – заряд і n – концентрація носіїв струму відповідно.

Розрахунок термо-е.р.с. проводився із використанням виразу, який дозволяє визначити її складові для конкретного механізму розсіювання:

$$\alpha = \frac{\pi^2 k^2 T \left(r + \frac{3}{2} - \frac{\frac{2F}{E_g}}{1 + \frac{2F}{E_g}} + \frac{3}{2} \frac{\frac{F}{E_g}}{1 + \frac{F}{E_g}} \right)}{3eF}, \quad (2)$$

де k – стала Больцмана, r – параметр розсіювання, F – енергія Фермі, E_g – ширина забороненої зони.

Сумарне значення термо-е.р.с. розраховували шляхом сумування кожної її складової $\alpha = \sum_i \alpha_i$.

Розрахунок електронної складової теплопровідності проводився згідно закону Відемана-Франца:

$$\chi_{ел} = L \sigma T, \quad (3)$$

де L – число Лоренца, яке для невідроджених напівпровідників визначається із виразу $L = (r + 2)(k_0 / e)^2$, r – параметр розсіювання – показник степеня у залежності довжини вільного пробігу від енергії, k_0 – стала Больцмана, e – заряд електрона, σ – коефіцієнт електропровідності, T – абсолютна температура.

Розрахунок граткової складової теплопровідності проводився з використанням емпіричного виразу:

$$\chi_{гр} = \frac{2k_0 \chi_{ел}}{\alpha e - 2k_0}. \quad (4)$$

Емпіричні вирази для розрахунку граткової складової теплопровідності згідно дають добре узгодження із експериментом.

Таблиця 1 - Термоелектричні коефіцієнти PbTe, легованого стибієм Sb при різних концентраціях домішки.

1 ат.% Sb				2 ат.% Sb			
T, K	σ , Ом ⁻¹ см ⁻¹	α , мкВ/К	χ , мВтсм ⁻¹ К ⁻¹	T, K	σ , Ом ⁻¹ см ⁻¹	α , мкВ/К	χ , мВтсм ⁻¹ К ⁻¹
77	7023,83	33,88	8,05	77	4864,34	33,86	5,57
200	3164,72	57,60	9,42	200	3221,01	57,72	9,58
300	2680,54	71,86	12,00	300	2607,47	71,89	11,60
0,25 ат.% Sb				1 ат.% Sb			
450	1152,81	82,69	7,72	450	986,73	81,34	6,61
600	615,31	91,92	5,49	600	502,69	90,25	4,49
800	380,93	101,02	4,53	800	272,20	99,01	3,24

Термоелектрична добротність розраховувалася із використанням виразу:

$$ZT = \frac{\alpha^2 \sigma}{\chi} T, \quad (5)$$

де $\chi = \chi_{ел} + \chi_{гр}$ – сумарна теплопровідність.

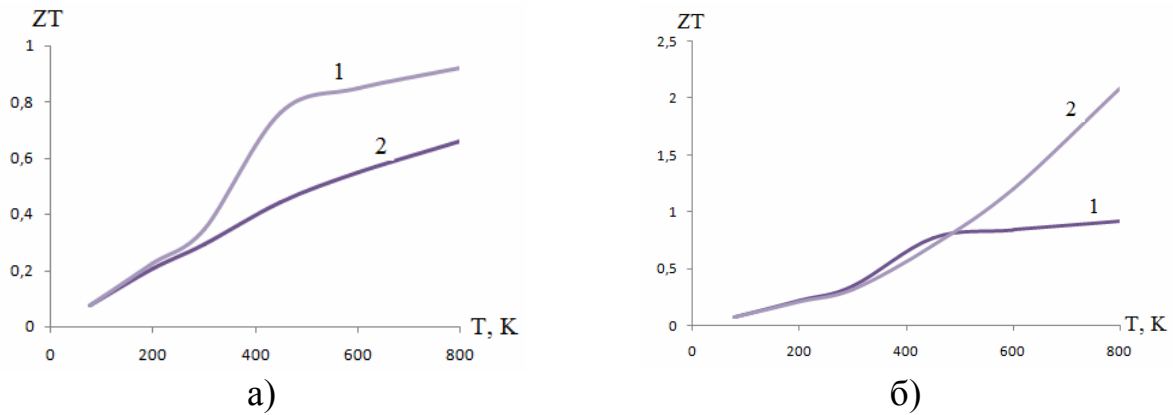


Рисунок 1 - Температурні залежності безрозмірної термоелектричної добротності ZT для зразків PbTe:Bi(Sb) вміст домішки 1 ат. % (а) та 2 ат. % (б): 1 – зразки леговані стибієм, 2 – зразки леговані бісмутом.

За описаною вище методикою виконане дослідження зразків $Pb_{1-x}Sn_xTe$ із різним складом $x=0,4; 0,5$ та $0,6$ у температурному діапазоні (300-800) К. Концентрація носіїв (дірок) при кімнатній температурі в досліджуваних зразках складала $(1,6-3,5) \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

Таблиця 2 - Експериментальні значення кінетичних параметрів твердого розчину $Pb_{1-x}Sn_xTe$

T, K	$\sigma, \text{ Ом}^{-1}\text{ см}^{-1}$			$\alpha, \text{ мкВ/К}$			$\chi, \text{ мВтсм}^{-1}\text{ К}^{-1}$		
	x=0,4	x=0,5	x=0,6	x=0,4	x=0,5	x=0,6	x=0,4	x=0,5	x=0,6
350	1564	1814	2742	39	31	26	25	28	37
400	1208	1529	2357	63	44	33	24	25	33
450	871	1283	2031	88	61	48	22	23	30
500	706	1032	1684	119	81	62	21	22	28
550	492	809	1395	147	104	80	19	20	25
600	371	711	1182	175	128	102	18	18	22
650	298	552	994	197	153	126	18	17	21
700	271	498	802	209	169	142	19	16	20
750	254	443	756	215	180	155	20	17	19

Електропровідність має відносно високі величини (завдяки зменшенню ефективної маси дірок) та плавну залежність від температури (за рахунок домішкового розсіювання).

Значення коефіцієнта термо-е.р.с. також має плавну залежність від температури. При високих температурах (близьких до 800 К) його значення досягає оптимальної величини для однозонного напівпровідника (~200 мкВ/К).

При низьких температурах (300–450 К) для зразків із $x=0,4$ та $0,5$ спостерігається зниження коефіцієнту теплопровідності за рахунок переважання ґраткової складової. Це пояснюється слабкою залежністю теплопровідності від температури, що є наслідком присутності домішкової компоненти розсіювання фононів.

УДК 538.945.7 + 544.015.4

Володимир Чобанюк, Тарас Паращук, Роман Грицак
*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

КВАНТОВО-ХІМІЧНИЙ АНАЛІЗ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ У КРИСТАЛАХ ЦИНК ХАЛЬКОГЕНІДІВ

Цинк халькогеніди – перспективні матеріали для створення світлодіодів, фоторезисторів, джерел спонтанного і когерентного випромінювання [1]. Однак для практичного застосування ZnS, ZnSe, ZnTe необхідна достовірна інформація про кристалічну структуру матеріалів.

У роботі побудовано молекулярні моделі поліморфних модифікацій кристалів цинк халькогенідів. На підставі результатів ab initio квантово-хімічних розрахунків кристалічної структури кластерів визначено температурні залежності енергії Гіббса сфалеритної та вюрцитної модифікацій напівпровідників, а також зроблено оцінку температури фазового переходу «сфалерит-вюрцит» для цинк халькогенідів.

Для визначення термодинамічних параметрів використано кластерний підхід [2]. Розрахунок проводили за допомогою пакету програм FireFly [3] в рамках обмеженого методу Хартрі-Фока, з використанням валентного базисного набору SBKJС, який включає ефективний остовний потенціал.

Для розрахунку сфалериту були використані дві кластерні моделі цинк халькогенідів: кластери А і В. Модель А включає атом цинку, оточений двома дводендатними лігандами, і має загальну формулу $ZnC_2H_2X_4$. Кластер В, загальна формула якого $Zn_4C_6H_6X_{13}$, містить атом цинку, оточений чотирма атомами халькогену, що відповідає реальному кристалу; всі ці атоми чотирикоординовані. Для насичення граничних зв'язків використовувались шість лігандів складу HCX_2 .

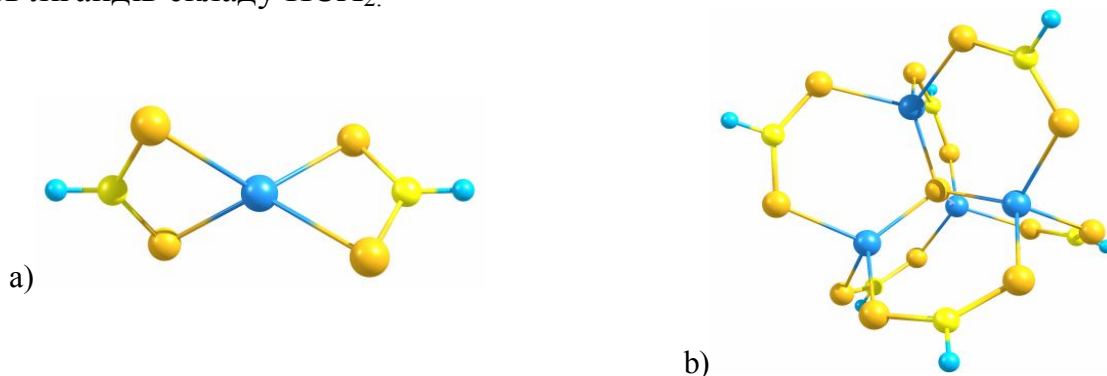


Рисунок 1 - Моделі кластерів А($ZnC_2H_2X_4$) (а) і В ($Zn_4C_6H_6X_{13}$) (b) для сфалеритної модифікації цинк халькогенідів.

Структура вюрциту досліджена за допомогою трьох моделей: С, D, E. Кластер С (загальна формула $Zn_{15}X_{15}$) є базовою для розрахунку просторової та електронної будови, а також термохімічних величин. Дана модель складається з 30 атомів і містить дві чотирикоординовані пари, вісім трикоординованих пар та п'ять двокоординованих пар атомів. Кластер D (з загальною формулою

$Zn_{11}Se_{11}$) складається з 22 атомів. Він містить одну чотирикоординовану, шість трикоординованих і чотири двокоординовані пари атомів. Кластер Е вюрцитної модифікації (з загальною формулою $Zn_{10}Se_{10}$) складається з 20 атомів. Він містить одну чотирикоординовану, чотири трикоординованих і п'ять двокоординованих пар атомів.

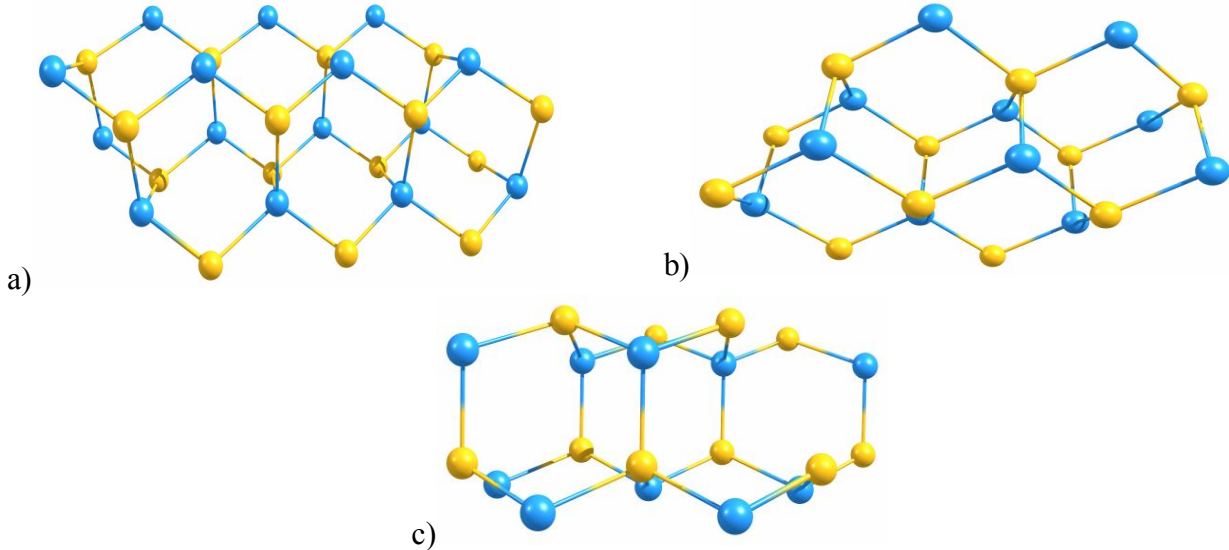


Рисунок 2 - Моделі кластерів С ($Zn_{15}Se_{15}$) (a), D ($Zn_{11}S_{11}$) (b), E ($Zn_{10}Se_{10}$) (c) для вюрцитної модифікації цинк халькогенідів.

При обчисленні енергії Гіббса ΔG_1 утворення сфалеритної фази використовувалися два кластери. Спочатку розраховувалась енергія Гіббса кластера А, згідно [1]:

$$\Delta G = G - \sum E_{\ddot{a}\ddot{e}} + \sum \Delta H_{\ddot{a}\ddot{o}}, \quad (1)$$

де G - загальна енергія Гіббса системи; $E_{\ddot{a}\ddot{e}}$ - електронна енергія атомів, що складають систему; $\Delta H_{\ddot{a}\ddot{o}}$ - енергія атомізації атомів. Загальну та електронну енергію системи отримано з результатів розрахунку, а всі інші величини – із довідникових матеріалів. Аналогічним чином була розрахована ентальпія утворення кластера В. У випадку із сфалеритом, від величини ΔG утворення кластера В віднімалась потрібна величина ΔG утворення кластера А. Тобто від ΔG кластера, що складається з фрагменту кристала сфалериту та трьох лігандів, віднімалась ΔG трьох лігандів. Отримане значення енергії Гіббса $\Delta G_1(T)$ можна віднести до кристала сфалериту [4].

Для розрахунку енергії Гіббса ΔG_2 кристала вюрциту спочатку розраховувалась енергія Гіббса кластерів С, D, E за методикою описаною вище, а потім складалась система рівнянь:

$$\begin{cases} 2\Delta G_4^* + 8\Delta G_3^* + 5\Delta G_2^* = \Delta G_C \\ \Delta G_4^* + 6\Delta G_3^* + 4\Delta G_2^* = \Delta G_D \\ \Delta G_4^* + 4\Delta G_3^* + 5\Delta G_2^* = \Delta G_E, \end{cases} \quad (2)$$

де коефіцієнти перед ΔG_i^* відповідають кількості пар зв'язків із координаційним числом, що дорівнює індексу $i = 2, 3, 4$ біля ΔG_i^* ; ΔG_C , ΔG_D і

ΔG_E – енергії Гіббса кластерів C, D, E відповідно. Тоді ΔG_4^* – шукана величина енергії Гіббса для кристала при заданій температурі.

Система рівнянь (2) розв’язувалась аналітично за допомогою оберненої матриці з використанням формул Крамера. У результаті отримано наступне співвідношення для визначення енергії Гіббса вюрцитної модифікації кристалів цинк халькогенідів:

$$\Delta G_4^* = \frac{7\Delta G_C - 10\Delta G_D + \Delta G_E}{5} \quad (3)$$

Температурні залежності енергії Гіббса для сфалеритної і вюрцитної модифікацій цинк халькогенідів $\Delta G_1(T)$, $\Delta G_2(T)$ представлені на рис. 3. Їх аналітичні вирази для кожної сполуки відповідно, мають вигляд:

- для цинк сульфід: $\Delta G_1(T) = 0,3736T + 108,68$, $\Delta G_2(T) = -1,1384T + 2307,1$;

- для цинк селенід: $\Delta G_1(T) = 0,3786T + 434,41$, $\Delta G_2(T) = -0,344T + 1466$;

- для цинк телурид: $\Delta G_1(T) = 0,3613T + 360,75$; $\Delta G_2(T) = -1,21T + 2531,5$.

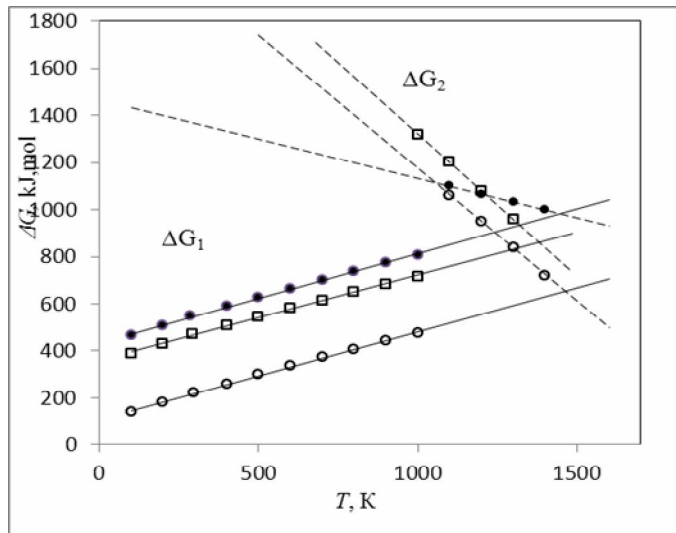


Рисунок 3 - Температурні залежності енергії Гіббса для сфалеритної (суцільні лінії) ΔG_1 і вюрцитної (штрихові лінії) модифікацій цинк халькогенідів.

Із хімічної термодинаміки відомо, що при переході речовини із однієї фази в іншу, в тому числі при поліморфних фазових переходах, реакція буде відбуватися до тих пір, поки ентропії однієї і другої фаз стануть однаковими. Тобто, взявши до уваги співвідношення $S = -\Delta G / \Delta T$ стає очевидним, що рівність величини ΔG для сфалериту і вюрциту при тій же температурі визначає температуру фазового переходу T_K між даними модифікаціями. У нашому

випадку, точка перетину залежностей $\Delta G_1(T)$ і $\Delta G_2(T)$ буде відповідати температурі фазового переходу від сфалериту до вюрциту, яка для ZnS згідно отриманих нами даних становить $T_K=1454$ К, для ZnSe – $T_K=1427$ К, для ZnTe – $T_K=1382$ К.

- [1]. Д.М. Фреїк, М.О. Галушак, Г.Я. Бабушак та ін. ФХТТ 7, 701(2006).
- [2]. В.А. Губанов, Е.З. Курмаев, А.Л. Ивановский, *Квантовая химия твёрдого тела* (Наука, Москва, 1984).
- [3]. <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>.
- [4]. J. Breidung, W. Thieland, A. Komornicki, Phys. Lett **153**, 76 (1988).

УДК 535.3, 535.5

Галина Гургула, Наталія Фреїк, Тетяна Вінтоняк

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника
м. Івано-Франківськ, Україна*

КРИСТАЛОХІМІЯ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ ТА ЇХ КОМПЛЕКСІВ У НЕСТЕХІОМЕТРИЧНИХ ТЕ ЛЕГОВАНИХ КРИСТАЛАХ ЦИНК ХАЛЬКОГЕНІДІВ

Інтерес до напівпровідників $A^{II}B^{VI}$ і, зокрема, цинк халькогенідів, пов'язаний з їх практичним використанням (світлодіоди і лазери ближнього інфрачервоного і видимого діапазону оптичного спектра, сонячні елементи, датчики рентгенівського і гама-випромінювання, бар'єрний матеріал для створення низькорозмірних структур – квантові точки, квантові ями, надгратки тощо) та в якості модельних об'єктів для теоретичних досліджень. Однак широкому практичному застосуванню цинк халькогенідів до сьогоденного часу перешкоджають значні технологічні труднощі їх отримання з контрольованими електрофізичними параметрами, які, в свою чергу, визначаються різного роду дефектами кристалічної ґратки.

На основі кристалохімічного формалізму, виконано аналіз дефектних підсистем у чистих ZnX ($X=S, Se, Te$) та легованих $ZnX:Cu(Mg, In, O)$, $ZnX:O:Cu(In)$ цинк халькогенідах. Розроблено кристалохімічні формули для нестехіометричних $n-ZnX$, $p-ZnX$ і самолегованих $n-ZnX:X$, $p-ZnX:Zn$ кристалів та визначено вид і зарядовий стан домінуючих точкових дефектів, знайдено залежності їх концентрації (N), концентрації вільних носіїв (n , p), холлівської концентрації носіїв струму (n_H) від величини і характеру відхилення від стехіометрії та вмісту самолегуючого елемента, встановлено умови реалізації термодинамічних n - p - або p - n -переходів. Визначено кристалохімічні механізми легування цинк халькогенідів елементами різних підгруп Періодичної таблиці (Cu, Mg, In, O). Показано, що купрум у $ZnSe:Cu$ розміщується у міжвузлях (Cu_i^+ , Cu_i^{2+}), магній і індій заміщають цинк у катіонній підґратці (Mg_{Zn}^x , In_{Zn}^+), кисень у $n-ZnX$ заміщає халькоген (O_X^x), а у p -типі – вкорінюється у міжвузлях (O_i^{2-}). При подвійному легуванні у $ZnS(Se):O:Cu$ формуються комплекси ($O_X Zn_i V_{Zn}$), ($O_X Cu_i V_{Zn}$) різного зарядового стану та нейтральні і однозарядні асоціати ($In_{Zn}^+ V_{Zn}^-$)^x, ($In_{Zn}^+ V_{Zn}^{2-}$)⁻ і ($O_X^x Zn_i^+ V_{Zn}^{2-}$)⁻ у $ZnS(Se):O:In$ відповідно. Визначено область хімічних складів та величини відхилення від стехіометрії у цинк халькогенідах, при яких отримується матеріал з електронною чи дірковою провідністю. З'ясовано вплив домішок купруму, магнію, індію та кисню на електричні властивості кристалів цинк халькогенідів і умови формування термодинамічного p - n -переходу.

Отримані двовимірні та тривимірні діаграми “концентрації дефектів (носіїв заряду) – хімічний склад” визначають технологічні фактори, що забезпечують отримання кристалів із наперед заданими властивостями.

УДК 621.315.592

Роман Дзумедзей, Тетяна Гевак, Юлія Бандура, Михайло Котик

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

ОСОБЛИВОСТІ РОЗРАХУНКУ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ КРИСТАЛІВ PbTe:Sb(Bi)

Теплопровідність напівпровідників визначається різними механізмами переносу тепла. У такому випадку коефіцієнт теплопровідності можна представити як суперпозицію складових:

$$\chi = \chi_{el} + \chi_{gr} + \chi_{ph} + \chi_b, \quad (1)$$

тут χ_{el} – електронна, χ_{gr} – граткова, χ_{ph} – фотонна і χ_b – біполярна. Завдяки відносно малому значенню ширини забороненої зони PbTe, фотонною та біполярною складовими можна знехтувати.

Вимірювання теплопровідності у сильному магнітному полі є простим та надійним способом розділення теплопровідності на граткову (експериментально вимірюється граткова складова теплопровідності) та електронну ($\chi_{el} = \chi_0 - \chi_{gr}$, де χ_0 – повна теплопровідність, виміряна при відсутності магнітного поля) складові.

Розрахунок електронної складової проводився згідно закону Відемана-Франца:

$$\chi_{el} = L \sigma T, \quad (2)$$

де L – число Лоренца, яке для невідроджених напівпровідників визначається із виразу $L = (r + 2)(k_0 / e)^2$, r – параметр розсіювання – показник степеня у залежності довжини вільного пробігу від енергії, k_0 – стала Больцмана, e – заряд електрона, σ – коефіцієнт електропровідності, T – абсолютна температура.

Точний розрахунок граткової складової теплопровідності загалом є можливим, але вимагає вивчення енергетичної структури та ангармонічних процесів у кристалах та доброго узгодження з рівнянням Больцмана, що вимагає громіздких математичних розрахунків.

Враховуючи вищесказане стає зрозумілою наявність багатьох емпіричних чи напівемпіричних виразів для розрахунку граткової складової теплопровідності. Так, зокрема, ще в роботах Аскерова та інших дослідників були запропоновані вирази для розрахунку граткової складової теплопровідності:

$$\chi_{gr} = \frac{a}{\sqrt{T}}, \quad (3)$$

де a – коефіцієнт, який вибирається таким чином, щоб температурні залежності були близькими до експериментальних даних.

$$\chi_{\text{ел}} = \chi_0 \left(1 - \frac{\alpha^2 \sigma}{\chi_0} \right), \quad (4)$$

де α – коефіцієнт термо-е.р.с.

$$\chi_{\text{гр}} = \frac{2k_0 \chi_{\text{ел}}}{\alpha e - 2k_0}. \quad (5)$$

Вирази (3)-(5) згідно літературних даних дають добре узгодження із експериментом. В нашому розрахунку ми використовували вираз (5) для визначення граткової складової теплопровідності.

Таблиця 1 - Значення теплопровідності PbTe:Bi(Sb), залежно від вмісту домішки.

ат. %	77 К	200 К	300 К	450 К	600 К	800 К
Bi						
0,25	20	9	8,8	–	–	–
0,5	17,3	8,8	8,5	–	–	–
1	12,4	11,1	8,3	–	–	–
2	–	–	12,4	10,1	9	6,5
Sb						
1	–	–	19,7	12,1	4,7	4,1
1,5	–	–	21,3	9,6	4,6	5,6
2	–	–	19,1	7	5,3	4,6

Розрахунки електропровідності та термо-е.р.с. були проведені для такого ж вмісту домішок ((0.25, 0.5, 1 та 2) ат. % Bi та сурми (1, 1.5 та 2) ат. % Sb) для цього ж інтервалу температур (77-800 К).

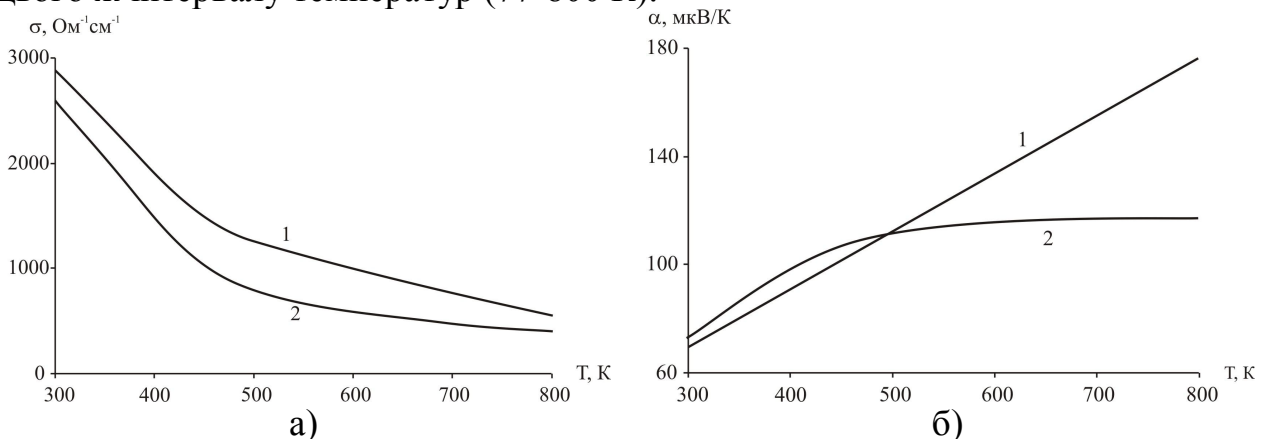


Рисунок 1 - Температурні залежності електропровідності σ (а) та термо-е.р.с. α (б): PbTe:Bi (1), PbTe:Sb (2).

Якщо порівнювати домішку вісмуту і сурми з однаковим вмістом (2 ат. %) видно, що PbTe:Bi володіє більшими значеннями електропровідності та термо-е.р.с. на цілому температурному діапазоні (рисунок 1). Із рисунка 1 (б) видно, що крива 1 (зразки PbTe:Bi) зростає лінійно, а крива 2 (зразки PbTe:Sb) виходить на насичення. Цю поведінку можна пояснити різною розчинністю легуючих домішок в плюмбум телурид. З позиції вищої розчинності вісмуту можна пояснити і вищі значення електропровідності у PbTe:Bi (рисунок 1 (а)).

УДК 535.3, 535.5

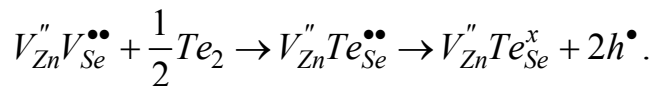
Марія Вадюк, Олександра Пташник

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
 м. Івано-Франківськ, Україна*

ДЕФЕКТНА ПІДСИСТЕМА І ВЛАСТИВОСТІ ІЗОВАЛЕНТНО ЛЕГОВАНИХ КРИСТАЛІВ ЦИНК СЕЛЕНІДУ

Цинк селенід є одним з перспективних матеріалів твердотільної електроніки. Він використовується для створення лазерних екранів, інжекційних світлодіодів, лазерів у синій області спектра, сцинтиляційних датчиків, фоторезисторів, джерел спонтанного і когерентного випромінювання. Ширина його забороненої зони охоплює область енергії фотонів, включаючи синьо-блакитну, а висока ефективність можливих генераційно-рекомбінаційних процесів визначається прямозонною структурою. Легування сторонніми домішками істотно впливає на фізико-хімічні властивості матеріалу. В якості сторонніх легуючих домішок використовують елементи I, III, V та VII груп Періодичної таблиці елементів. Запропоновано кристалоквазіхімічні формули для легованого телуrom кристалів n-ZnSe:Te та p-ZnSe:Te і на їх основі розраховано залежності концентрації переважаючих точкових дефектів, вільних носіїв та холлівської концентрації від вмісту легуючої домішки. Так, легування кристалів Te призводить до утворення комплексу $V_{Zn}^{2-}Te_{Se}^x(Zn_i^+)_n$.

При легуванні n-ZnSe телуrom легуючий кластер матиме вигляд:



Маючи на увазі, що у цьому випадку переважаючими точковими дефектами є двозарядні $Zn_i^{\bullet\bullet}$ та однозарядні Zn_i^\bullet міжвузлові атоми цинку, однозарядні вакансії селену V_{Se}^\bullet та двозарядні вакансії цинку $V_{Zn}^{//}$. Кристалоквазіхімічна формула відповідно буде:

$$\left(Zn_{((1-\alpha)+\alpha\gamma)(1-x)}^x \right)_{Zn} \left(Se_{(1-\alpha)(1-x)}^x V_{\alpha\gamma(1-x)}^\bullet \right)_{Se} \left(Zn_{\alpha(1-\gamma)(1-\delta)(1-x)-nx}^\bullet Zn_{\alpha(1-\gamma)\delta(1-x)}^{\bullet\bullet} \right)_i \\ \left(V_{Zn}^{//} V_{Se}^\bullet \right)_{\alpha(1-\gamma)(1-x)}' \left(V_{Zn}'' Te_{Se}^x (Zn_i^\bullet)_n \right)_x + \alpha(1-x)(1+\gamma+\delta-\gamma\delta)e' + (\alpha(1-x)+2x)h^\bullet,$$

x – атомна частка надлишкового телуру.

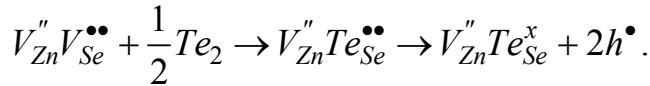
Концентрація дефектів визначатиметься залежностями:

$$\left[V_{Se}^+ \right] = A\alpha\gamma(1-x), \quad \left[Zn_i^+ \right] = A(\alpha(1-\gamma)(1-\delta)(1-x) - nx), \\ \left[Zn_i^{2+} \right] = A\alpha\delta(1-\gamma)(1-x), \quad \left[V_{Zn}^{2-} V_{Se}^+ \right] = A(\alpha(1-\gamma)(1-x)), \quad \left[V_{Zn}^{2-} Te_{Se}^x (Zn_i^+)_n \right] = Ax, \\ n = A\alpha(1-x)(1+\gamma+\delta-\gamma\delta), \quad p = A(\alpha(1-x)+2x).$$

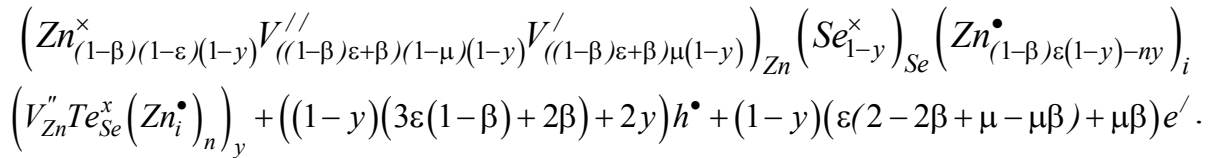
Рівняння електронейтральності матиме вигляд:

$$\left[V_{Zn}^{2-} V_{Se}^+ \right]' + n = \left[Zn_i^+ \right] + 2 \left[Zn_i^{2+} \right] + \left[V_S^+ \right] + p$$

У випадку легування ZnSe р-типу провідності телуrom (p-ZnSe:Te) відповідний кластер матиме вигляд:



Кристалоквазіхімічна формула p-ZnSe:Te буде наступною:



Тут у – атомна доля надлишкового телуру. Концентрації дефектів при цьому будуть:

$$\begin{aligned} [V_{Zn}^{2-}] &= A((1-\beta)\varepsilon + \beta)(1-\mu)(1-y), \\ [V_{Zn}^-] &= A((1-\beta)\varepsilon + \beta)\mu(1-y), \\ [V_{Zn}^{2-} Te_{Se}^x (Zn_i^+)_n] &= Ay, \\ p &= A((1-y)(3\varepsilon(1-\beta) + 2\beta) + 2y). \end{aligned} \quad \begin{aligned} [Zn_i^+] &= A((1-\beta)\varepsilon(1-y) - ny), \\ n &= A(1-y)(\varepsilon(2-2\beta + \mu - \mu\beta) + \mu\beta), \end{aligned}$$

Рівняння електронейтральності матиме вигляд:
 $2[V_{Zn}^{2-}] + [V_{Zn}^-] + n = [Zn_i^+] + p$, а холлівська концентрація носіїв: $n_H = |n - p|$.

Результати розрахунку приведені на рис. 1, 2.

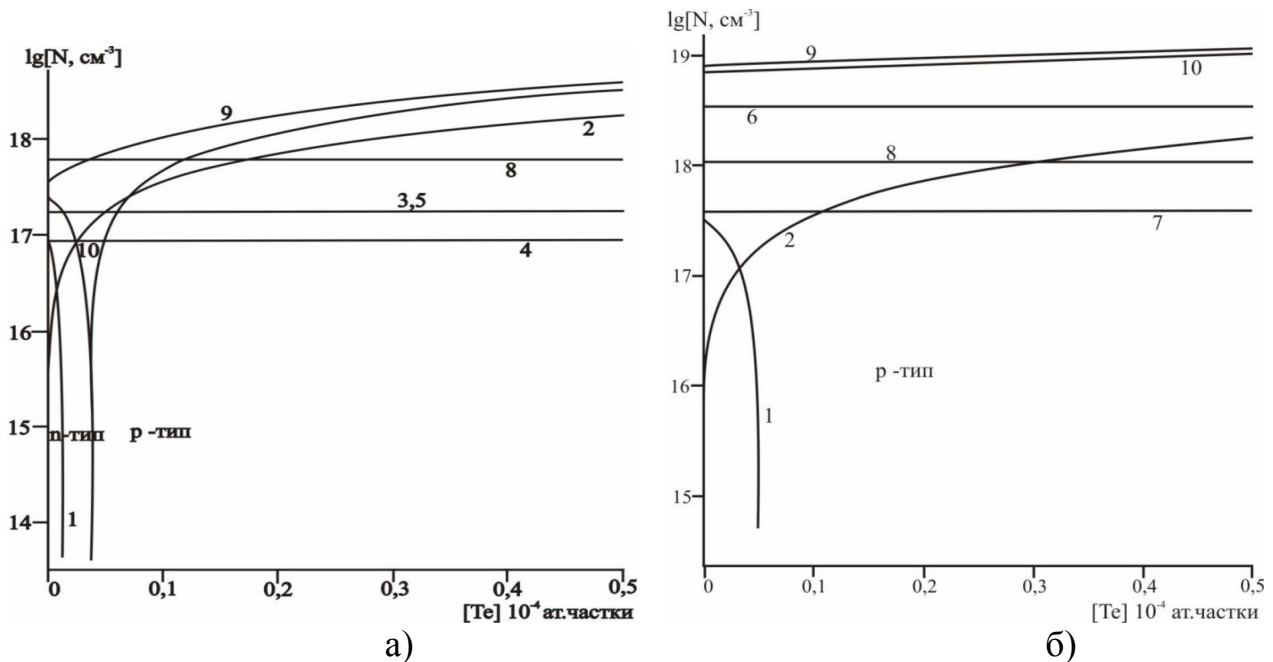
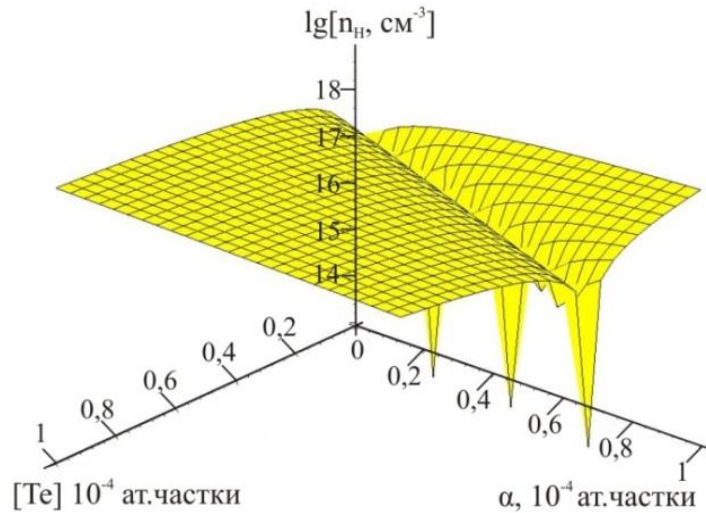
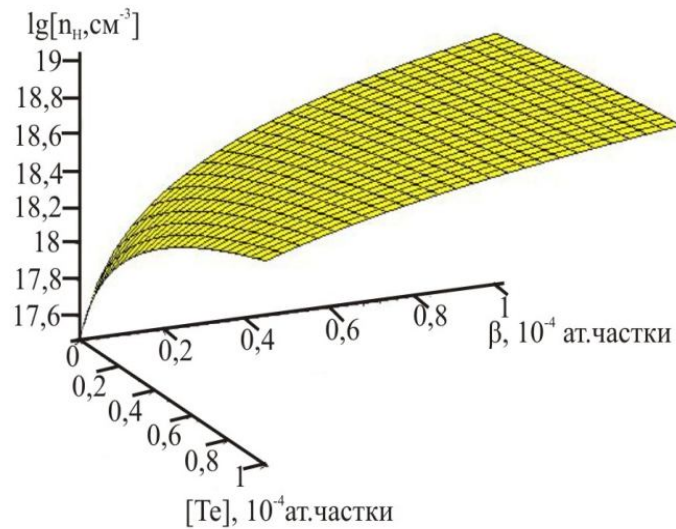


Рисунок 1 - Залежність концентрації переважаючих точкових дефектів N: 1- $[Zn_i^+]$, 2- $[V_{Zn}^{2-} Te_{Se}^x (Zn_i^+)_n]$, 3- $[V_{Se}^+]$, 4- $[Zn_i^{2+}]$, 5- $[V_{Zn}^{2-} V_{Se}^+]$, 6- $[V_{Zn}^{2-}]$, 7- $[V_{Zn}^-]$, основних носіїв 8-п, 9-р та холлівської концентрації 10- n_H , у n-ZnSe:Te (а) та p-ZnSe:Te (б) від концентрації легуючого компонента [Te] ($\alpha = 0,1 \cdot 10^{-4}$ мол. частки, $\gamma = 0,5$, $\delta = 0,5$; $\beta = 0,1 \cdot 10^{-3}$ мол. частки, $\mu = 0,1$, $\varepsilon = 0,1 \cdot 10^{-4}$), де n=2 це кількість міжвузлових атомів цинку.



а)



б)

Рисунок 2 - Просторова залежність холлівської концентрації n_H від відхилення від стехіометрії α (Zn) – а, β (Se) – б та вмісту легуючої домішки [Te] для кристалів n-ZnSe:Te (а) та p-ZnSe:Te (б).

Показано, що із збільшенням відхилення від стехіометрії на бік цинку концентрація телуру зростає, так само, із збільшенням кількості цинку у власних вузлах та величини диспропорціювання міжвузлового цинку зростає концентрація телуру, при якій настає конверсія типу провідності із n- на р-тип.

Виявлено, що при легуванні кристалів ZnSe:Te утворюється комплекс $V_{Zn}^{2-}Te_{Se}^x(Zn_i^+)_n$, де $n = 2$ – це кількість міжвузлових атомів цинку. Тому, при збільшенні концентрації телуру, міжвузлові атоми цинку $[Zn_i^+]$ різко спадають, проте, зростає концентрація комплексу $[V_{Zn}^{2-}Te_{Se}^x(Zn_i^+)_n]$, бо всі міжвузлові атоми цинку входять у цей комплекс.

УДК 535.3, 535.51

Лілія Туровська, Любов Юрчишин, Інна Андрійшин
*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

КРИСТАЛОХІМІЧНІ МОДЕЛІ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ КРИСТАЛІЧНИХ СТРУКТУР НА ОСНОВІ ГЕРМАНІЙ, СТАНУМ І ПЛЮМБУМ ТЕЛУРИДІВ

Германій, станум і плюмбум телуриди – середньотемпературні (600-850 К) термоелектричні матеріали, які характеризуються або двосторонньою областю гомогенності, як у PbTe, або повністю зміщеною на боці телуру, як у SnTe, GeTe. Це є причиною утворення значної кількості заряджених дефектів і високої концентрації носіїв. Утворення твердих розчинів та легування активними домішками сприяють зменшенню концентрації носіїв і покращенню термоелектричної добротності матеріалу.

В рамках кристалоквазіхімічного формалізму запропоновано моделі нестехіометричного p- та n-PbTe зі складним спектром точкових дефектів (V_{Pb}^{2-} , V_{Pb}^{-} , V_{Te}^{2+} , Pb_i^{2+} , Te_i^0), p-SnTe і p-GeTe ($V_{Sn(Ge)}^{2-}$, $V_{Sn(Ge)}^{4-}$), а також потрійних систем Pb-Ga (In, Tl, Mn, Cr, Sn, Bi, Sb)-Te. На основі розроблених кристалоквазіхімічних формул і рівнянь повної електронейтральності розраховано залежності концентрації точкових дефектів, електронів і дірок, а також холлівської концентрації носіїв струму від величини і характеру відхилення від стехіометрії в основній матриці PbTe і складу твердого розчину.

Встановлено, що донорний (Ga, In) або акцепторний (Tl) вплив домішок III групи Періодичної таблиці у плюмбум телуриді визначається механізмом легування і величиною диспропорціонування їх зарядових станів (+3 і +1 відповідно). За умови превалювання домішки в стані +3 формується матеріал n-типу (PbTe<Ga(In)>), а в стані +1 – p-типу (PbTe<Tl>). Порівнянням результатів експерименту і кристалохімічних розрахунків визначено домінуючі механізми утворення твердих розчинів PbTe-GaTe (InTe, TlTe) і PbTe-Ga₂Te₃ (In₂Te₃, Tl₂Te₃). Показано, що якщо в першому випадку важливу роль відіграє диспропорціонування зарядового стану домішки Ga (In, Tl), то в другому домінує впровадження йонів Ga (In, Tl) у тетраедричне оточення телуру кристалічної структури PbTe.

На основі запропонованих кристалоквазіхімічних формул твердих розчинів системи Pb-Mn-Te показано, що домінуючим механізмом їх утворення є заміщення йонами Мангану катіонних вакансій у випадку p-PbTe-MnTe і добудова підгратки металу у n-PbTe-MnTe. Для твердих розчинів p-PbTe-MnTe₂ (n-PbTe-MnTe₂) переважає механізм заміщення Манганом (IV) вакансій Плюмбуму (добудова катіонної підгратки) з домінуванням точкових дефектів Mn_{Pb}^{2+} і V_{Pb}^{2-} .

Використовуючи метод квазіхімії та кристалоквазіхімічний формалізм, пояснено донорну дію домішки у легуваному хромом плюмбум телуриді та

визначено константу йонізації $Cr_{Pb}^0 = Cr_{Pb}^+ + e^-$. Для твердих розчинів PbTe-CrTe на основі пюмбум телуриду при реалізації механізму заміщення домінують вакансії Пюмбуму для матеріалу р-типу і вакансії Телуру для n-типу, а збільшення вмісту хром телуриду веде до зростання концентрації основних носіїв струму. Зменшення параметра ґратки і концентрації основних носіїв заряду в твердому розчині PbTe-Cr₃Te₄ при збільшенні вмісту легуючої сполуки пояснено механізмом заміщення Хромом Пюмбуму, що обумовлює різке зростання концентрації таких точкових дефектів як Cr_{Pb}^+ , V_{Pb}^{2-} , Cr_{Pb}^0 у матеріалі n-типу і Cr_{Pb}^+ , Pb_i^+ , Cr_{Pb}^0 – р-типу відповідно.

Запропоновано кристалоквазіхімічні формули легованих перехідними металами (Co, Ni) кристалів пюмбум телуриду. Встановлено, що для PbTe:Co (Ni) домінуючими точковими дефектами, крім власних, є домішкові Co_i^{3+} (Ni_i^{3+}) і Cr_{Pb}^0 (Ni_{Pb}^0), співвідношення між якими обумовлює наявні фізико-хімічні властивості. Визначено значення величин диспропорціонування зарядового стану домішок перехідних металів та їх вплив на реалізацію конверсії типу провідності.

В рамках кристалоквазіхімічного формалізму проведено аналіз дефектної підсистеми кристалів в системах Pb-Bi (Sb)-Te. Домішки Sb и Bi в PbTe є донорами, причому частка електрично активних атомів значно менша одиниці, що може свідчити про перерозподіл атомів домішки між катіонною та аніонною підґратками. В легованих кристалах PbTe:Bi Бісмут, заміщуючи Пюмбум в його підґратці, йонізується із стану $Bi^0(6s^26p^3)$ в стан $Bi^{3+}(6s^26p^0) + 3e^-$. Відносно підґратки Pb^{2+} домішка знаходиться в стані $Bi^{3+} \rightarrow Bi_{Pb}^+$ (де вона є донором). В підґратці Телуру Бісмут йонізується $Bi^0(6s^26p^3) \rightarrow Bi^{3-}(6s^26p^6) + 3h^+$ і є акцептором, і при цьому відносно підґратки Te^{2-} домішка знаходиться в стані $Bi^{3-} \rightarrow Bi_{Te}^-$. Аналогічна ситуація справедлива і для кристалів PbTe:Sb, що й обумовлює експериментально спостережувану амфотерну дію домішок V групи. Розраховані залежності холлівської концентрації точкових дефектів кристалів n- и p-PbTe:Bi (Sb) від вмісту домішки (рисунк 1).

Показано, що домінуючими дефектами в даному випадку є йони Бісмуту (Стибію) у вузлах кристалічної ґратки пюмбум телуриду Bi_{Pb}^{1+} (Sb_{Pb}^{1+}), Bi_{Te}^{1-} (Sb_{Te}^{1-}), двозарядні вакансії Телуру V_{Te}^{2+} і Пюмбуму V_{Pb}^{2-} . Розраховані значення величин диспропорціонування зарядового стану домішок Бісмуту і Стибію, які визначають співвідношення між домішкою в стані Bi^{3+} (Sb^{3+}) і Bi^{3-} (Sb^{3-}), та її вплив на реалізацію конверсії провідності для кристалів PbTe:Sb (Bi).

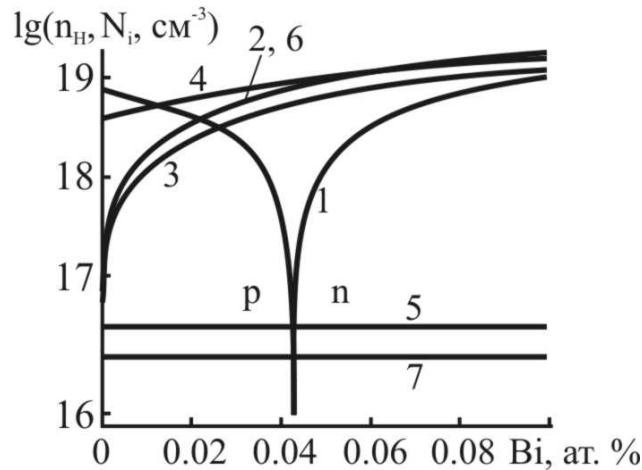


Рисунок 1 - Залежність холлівської концентрації носіїв струму ($1 - n_H$) і концентрації точкових дефектів в кристалах p-PbTe:Bi від вмісту легуючої домішки. N_i : 2 – Bi_{Pb}^{1+} ; 3 – Bi_{Te}^{1-} ; 4 – V_{Pb}^{2-} ; 5 – V_{Pb}^{-} ; 6 – V_{Te}^{2+} ; 7 – Te_i^0 .

Проаналізовано залежність термоелектричних параметрів твердих розчинів PbTe-Bi₂Te₃ і PbTe-Sb₂Te₃ від складу і температури та запропоновано кристалохімічні механізми їх утворення. На основі розроблених кристалоквазіхімічних формул розраховано залежності холлівської концентрації носіїв струму і концентрації окремих точкових дефектів твердих розчинів від складу та початкового відхилення від стехіометрії в основній матриці n-PbTe і p-PbTe. Встановлено, що домінуючим механізмом утворення твердих розчинів PbTe-Bi₂Te₃ (Sb₂Te₃) є заміщення Бісмуту (Стибієм) позицій Плюмбуму Bi_{Pb}^+ (Sb_{Pb}^+) з утворенням міжвузлового Телуру Te_i^0 . Показано, що йонізований Стибій Sb_{Pb}^+ і вакансії Телуру V_{Te}^{2+} зумовлюють зростання електронної складової теплопровідності, а нейтральні міжвузлові атоми Телуру Te_i^0 – зменшення ґраткової складової теплопровідності у твердому розчині n-PbTe-Sb₂Te₃ зі збільшенням вмісту Sb₂Te₃.

Аналізом дефектної підсистеми твердого розчину PbTe-SnTe методами кристалоквазіхімічного формалізму визначено вплив хімічного складу і відхилення від стехіометрії на боці телуру на співвідношення між дво- (V_i^{2-}) і чотиризарядними (V_i^{4-}) вакансіями у катіонній підґратці та термоелектричні властивості матеріалу. Встановлено, що домінуючими точковими дефектами в даному випадку є дво- та чотиризарядні металічні вакансії.

Встановлено, що елементи IV групи Періодичної таблиці (Pb, Ge і Si) до концентрацій 5 ат. % у SnTe мають слабкий вплив на термоелектричні властивості. Тоді, як елементи V групи (Bi, Sb, As) діють як донори. Атоми Йоду виявляють донорні властивості, заміщуючи атоми Te у SnTe. Зміна коефіцієнта термо-е.р.с. залежить від виду легуючої домішки. Показано, що складне легування SnTe індій та аргентум телуридами забезпечує одержання максимальної термоелектричної ефективності. Термоелектрична ефективність сплаву на основі SnTe-PbTe-GeTe, легованого Sb₂Te₃, значно вища, ніж SnTe,

особливо у низькотемпературній (до 700 К) області. Експериментально спостережувану зміну кінетичних параметрів у сплавах на основі SnTe пояснено на основі уявлень про резонансні стани.

Показано, що основними напрямками оптимізації термоелектричних параметрів матеріалів на основі сполук PbTe, SnTe, GeTe є зменшення теплопровідності (PbTe-SnTe, PbTe-Sb₂Te₃), збільшення електропровідності і активності точкових дефектів (PbTe-SnTe, PbTe-GeTe) і введення нецентральных йонів домішок у тверді розчини (Pb-Te-Se-S).

Я.Я. Кость, І.А. Большакова, О.Ю. Макідо, Ф.М. Шуригін
Національний університет „Львівська політехніка”
м. Львів, Україна

ВІДТВОРЮВАНІ ТЕХНОЛОГІЇ ВИРОЩУВАННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ВІСКЕРІВ

Останніми роками сформувався інтерес вчених та розробників електронних пристроїв до одновимірних напівпровідникових кристалічних структур (віскерів) як елементарних напівпровідників - Ge та Si, так і багатокомпонентних систем, таких як напівпровідники групи A_3B_5 та твердих розчинів на їх основі. Відомі переваги властивостей віскерів перед об'ємним матеріалом роблять актуальним створення керованої та відтворюваної технології їх вирощування.

Питання відтворюваності технології вирощування напівпровідникових віскерів має і велике фундаментальне значення, оскільки це є єдині технології вирощування практично бездефектних монокристалів з параметрами, близькими до теоретичних.

В даній роботі представлений узагальнений досвід розробки технології вирощування віскерів різноманітних напівпровідників з паро-газової фази за допомогою хімічних транспортних реакцій та механізму пара-рідина-кристал (ПРК-механізм). За цим механізмом ріст нанодротин ініціюється з краплі евтектичного сплаву металу-катализатора з матеріалом напівпровідника.

Визначено, що процес вирощування віскерів напівпровідникових сполук з газової фази за даною технологією протікає в три етапи. На першому етапі спостерігається формування кластерів нанодротин за ПРК-механізмом. Ріст нанодротин відбувається в кінетичній області в певному кристалографічному напрямку.

На другому етапі створюються умови для оствальдового «дозрівання» нанодротин. На цьому етапі, внаслідок конкуруючого росту нанодротин, значна їх частина стає джерелом живлення парової фази, з якої продовжують нарощуватись нанодротини більших діаметрів. Цей самоузгоджений процес приводить до зменшення кількості нанодротин; їх діаметри в кінці цього етапу досягають декількох мікрметрів.

На третьому етапі відбувається нарощування нанодротин до мікророзмірів. Цей процес, який подібний до процесу епітаксійного росту, протікає в дифузійній області. Тривалість цього етапу визначає розміри кінцевих напівпровідникових віскерів.

Дана модель дозволяє реалізовувати технологію вирощування напівпровідникових віскерів як у закритій (ампульній) системі, так і у відкритій протічній системі.

В доповіді будуть запропоновані загальні технологічні підходи до створення відтворюваної технології вирощування якісних віскерів напівпровідникових матеріалів з газової фази, а також наведені конкретні технологічні режими отримання віскерів різних напівпровідникових матеріалів довжиною в десятки міліметрів і з поперечними розмірами від десяти до сотень мікрометрів.

УДК 546.536

Сергій Козицький

*Одеська національна морська академія,
м. Одеса, Україна*

ЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ZnS, ОТРИМАНОГО МЕТОДОМ САМОПОШИРЮВАНОВОГО ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗУ

В роботі [1] доведена можливість отримання полікристалічних зразків ZnS методом самопоширюваного високотемпературного синтезу (СВС). Отримані монолітні зразки циліндричної форми (діаметр 3-5 см, довжина 10-30 см) на поперечному зрізі мають три характерні зони: зовнішня – товщиною 0,5 мм, яка утворена з кристалів, характерний розмір яких ~ 1 мм; зона радіально орієнтованих стовбчастих кристалів з характерною довжиною $\sim 0,1$ мм та характерним поперечним розміром $\sim 0,03$ мм; центральна зона, яка утворена рівноосними кристалами з характерним розміром ~ 30 мкм.

Синтезовані зразки являють собою полікристали, де якісні кристали розділені прошарками, в яких відхилення від стехіометрії знаходиться на рівні ~ 1 моль % [1]. Провідність на постійному струмі синтезованих зразків ZnS $\sigma > 10^{-12} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$, тобто практично відсутня. В даній роботі досліджені діелектричні властивості отриманих методом СВС зразків ZnS на різних частотах та їх кореляції зі структурними властивостями отриманих зразків.

Ємність зразків C , повна провідність Σ та тангенс діелектричних втрат $tg\delta$ вимірювались на частотах 1 кГц та 1 МГц з допомогою мостів Е7-8 та Е7-12, відповідно. Зразки товщиною 2-3 мм вирізались перпендикулярно осі злитку. Вимірювальна комірка складалась з двох плоских мідних електродів круглої форми, центри яких лежали на осі симетрії.

Рівняння Пуассона $\Delta\varphi = 0$ для електродів циліндричної форми та для граничних умов $\varphi(0) = 0$ та $\varphi(d) = U$ має розв'язок:

$$\varphi(\rho, z) = A \cdot sh(kz) \cdot J_0(k\rho) \quad (1)$$

тут d - віддаль між електродами, а U - різниця потенціалів між електродами, J_0 - функція Бесселя нульового порядку.

Формула (1) дозволяє визначити напруженість електричного поля, скористатися законом Ома, розраховувати струм I між електродами, тоді для питомої провідності зразків отримуємо

$$\sigma = \frac{\Sigma \cdot d}{S_{\text{до}}} \quad (2)$$

де

$$S_{\text{до}} = \frac{\pi \cdot d \cdot a \cdot J_1(ka/2)}{sh(kd) \cdot J_0(kb/2)} \quad (3)$$

ефективний перетин комірки, де проводились вимірювання, J_1 - функція Бесселя першого порядку. Щоб розрахувати S_{ef} необхідно знати сталу k , яку знаходимо з умови рівності повного струму через обидва електроди [2]:

$$aJ_1(ka/2) = b \cdot ch(kd)J_1(kb/2) \quad (5)$$

Розв'язок трансцендентного рівняння (5) для двох типів зразків, які використовувались: $d_1 = 2 \text{ мм}$ та $d = 3 \text{ мм}$ дають: $k_{(2)} = 0,26 \text{ мм}^{-1}$, $k_{(3)} = 0,27 \text{ мм}^{-1}$ тоді $S_{\text{ef}(2)} = 160 \text{ мм}^2$, $S_{\text{ef}(3)} = 200 \text{ мм}^2$.

Діелектричну проникність зразків визначали з використанням формули для ємності C зразків

$$\varepsilon = \frac{C \cdot d}{\varepsilon_0 \cdot S_{\text{ef}}} \quad (6)$$

Дослідження проводили на синтезованому ZnS, отриманому із стехіометричної суміші. Крім того, досліджували зразки, які отримані при введенні 20% синтезованого попередньо ZnS у вигляді порошку в початкову шихту. Це зумовило збільшення центрів кристалізації, в результаті чого суттєво збільшилась густина синтезованого зразка і практично зникла зона стовпчастих кристалів за рахунок розширення центральної зони рівноважних кристалів.

Експериментальні та розраховані дані для двох типів зразків наведені в таблиці. Густина ρ визначили пікнометричним методом, питому провідність σ та діелектричну проникність ε розраховували за формулами (2) та (6), за результатами вимірів повної провідності зразків Σ та ємності C . Крім цього для підтвердження отриманих результатів, розраховували провідність σ на основі результатів вимірювань тангенсу кута втрат $tg\delta$ за формулою:

$$\sigma = \omega \cdot \varepsilon \cdot tg\delta \quad (7)$$

Таблиця 1

№	Зразок	Густина $\rho, \text{кг} / \text{м}^3$	ε	$\sigma_2, 10^{-6} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$		$tg\delta, 10^{-3}$		$\sigma_1, 10^{-6} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$	
				1кГц	1МГц	1кГц	1МГц	1кГц	1МГц
1	ZnS	3020	6,5	0,040	4,0	100	9,4	0,036	3,4
2	ZnS +20% кін.прод.	3650	7,6	0,014	1,6	28	2,8	0,012	1,2

Зауважимо, що отримані близькі значення, але розраховане за формулою (10) значення провідності на 10% менше, ніж σ , отримане з прямих вимірювань, що пов'язане з методикою вимірювань.

Зауважимо, що діелектрична проникність не проявляє анізотропії, а основний параметр, який впливає на величину ε , є густина ρ синтезованих зразків. Ізотропність дозволяє вважати достатню однорідність розподілу пор в зразках.

Отримані результати по діелектричній проникності можна пояснити в рамках моделі [3], яка розглядає рівномірний розподіл сферичних включень з діелектричною проникністю ε_1 в матеріал, густина якого ρ_2 та діелектрична проникність ε_2 . В цьому випадку [3]

$$\varepsilon_p = \varepsilon_2 + \frac{3\Omega\varepsilon_p(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{(2\varepsilon_p + \varepsilon_1) - \Omega(\varepsilon_1 - \varepsilon_p)}, \quad (8)$$

де $\Omega = (\rho_2 - \rho_1) / \rho_2$.

Проведені розрахунки за формулою (11) для $\varepsilon_1=1$, $\varepsilon_2=8,7$, $\rho_2=4,1 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ дають значення: $\varepsilon_\delta=7,6$ для ZnS та $\varepsilon_\delta=6,2$ для ZnS з додатком кінцевого продукту. Отримані в рамках вказаної моделі значення для діелектричної проникності добре узгоджуються з визначеними експериментально для даних типів зразків.

Зауважимо, що для досліджених зразків при збільшенні частоти зростає провідність, при цьому виконується закон Остина-Мотта:

$$\ln \sigma = s \cdot \ln \omega \quad (9)$$

з однаковим значенням $s=0,66$. Як встановлено авторами роботи [4], основні закономірності $\sigma(\omega)$ в широкому інтервалі частот для неупорядкованих систем зумовлені виникнення міграційних бар'єрів для носіїв струму. Вони отримали вираз для величини s через параметр α , який характеризує ступінь розупорядкованості системи:

$$s = 1 - \frac{2(2 + \alpha)}{(4 + \alpha)\sqrt{1 + \alpha}} \quad (10)$$

Скориставшись цією формулою, отримуємо $\alpha=26$, що вказує на суттєву неупорядкованість нашої системи, оскільки для неупорядкованої системи $\alpha \gg 1$.

В синтезованих полікристалічних зразках ZnS виникнення міграційних бар'єрів різної енергії зумовлено відхиленням від стехіометрії в прошарках між якісними кристалами [4] та високою концентрації кисню в них [1].

Автор висловлюють подяку В. М. Бондареву за цінні зауваження.

1. С.В. Козицький, В.П. Писарський, Д.Д. Поліщук, *Фізика і хімія твердого тіла* **4**, 749 (2003)
2. Ю.В. Воробьев, Ж. Гонсалес-Эрнандес, С. Химесес-Сандовал, С.В. Козицкий, Р.В. Захарченко, В.Н. Захарченко, *Неорганические материалы* **35**, 19 (1999).
3. Л.Г. Гречко, В.В. Мотрич, В.М. Огенько, *Химия, физика и технология поверхности* **1**, 17 (1993).
4. V.N. Bondarev, P.V. Pikhitsa, *Phys.Lett. A* **196**, 247 (1994).

УДК 535.373.1, 546.47

Сергій Козицький¹, Юрій Бачеріков².

¹Одеська національна морська академія
м. Одеса, Україна

²Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України,
м. Київ, Україна

ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ ZnS:Cu, ОТРИМАНОГО МЕТОДОМ САМОПОШИРЮВАННЯ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗУ

Люмінофори на основі сульфиду цинку, активованого міддю, широко використовуються як одні з найефективніших в зелено-блакитній області спектра, і технологія їх отримання досить добре розроблена. Однак, структура центрів люмінесценції, що включають іони Cu, в ряді випадків до цих пір не з'ясована. До теперішнього часу в багатьох аспектах досить детально вивчена природа так званих синіх (В-смуги з $\lambda_{\max} \sim 455$ нм) і зелених центрів (G-смуги з $\lambda_{\max} \sim 503$ нм) люмінесценції обумовлених Cu в ZnS. Встановлено, що центром, відповідальним за появу G-Cu смуги, є ізолюваний іон міді, що заміщає іон цинку в решітці ZnS. Синє світіння пов'язують з утворенням зародків фази Cu₂S - асоціатів типу CuZn-CuZn. Формування більш складних утворень в ZnS за участю Cu, таких як кластери міді або наночастинки, що впливають на ефективність люмінесценції, в літературі практично не розглядалося через труднощі, які пов'язані з виявленням та ідентифікацією таких об'єктів у матеріалі.

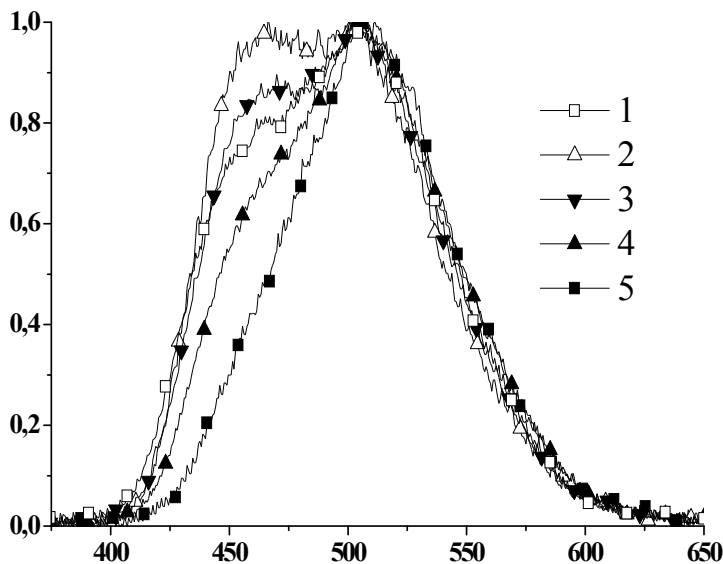


Рисунок 1 - Спектри ФЛ сульфиду цинку, легированного міддю з концентрацією Cu: 1 – 0,1 ваг.%; 2 – 0,2 ваг.%; 3 – 0,3 ваг.%; 4 – 0,6 ваг.%; 5 – 2 ваг.%.

В результаті, прояв у спектрах фотолюмінесценції (ФЛ) ZnS:Cu смуг, які пов'язують з іонами Cu, сильно залежить від умов синтезу, що впливають на формування структури активних центрів. Метою цієї роботи є вивчення впливу концентрації легуючих домішок Cu на характеристики ФЛ зразків ZnS, отриманих методом високотемпературного синтезу (СВС). Процеси формування фаз за участю Cu в сульфіді цинку вивчені шляхом детального порівняльного аналізу спектральних характеристик ФЛ та ЕПР

Для досліджень була синтезована серія люмінофорів на основі сульфиду цинку, легуваного міддю. За рахунок нерівноважності

процесу СВС вдається вводити домішки, концентрація яких значно перевищує рівноважну. Концентрація Cu в серії змінювалася від 0,1 до 2 ваг.%; Вихідні порошкові матеріали Zn і S бралися у стехіометричному співвідношенні.

Спектри ФЛ реєструвалися на установці КСВУ-23 при $T=300$ К, збудження ФЛ здійснювалося випромінюванням азотного лазера ЛГМ-21 ($\lambda=337,1$ нм). На рис. 1 представлені спектри ФЛ синтезованих люмінофорів ZnS:Cu з різним вмістом міді. Як видно з рисунка, спектри ФЛ являють собою складну широку смугу в синьо-зеленій області, що складається з декількох індивідуальних смуг. Зміна співвідношення хлориду міді до сірки і цинку в процесі синтезу призводить до перерозподілу інтенсивностей між ними (див. рис. 1). Для зразків з концентрацією міді $0 < N_{Cu} < 2$ ваг.% спектри ФЛ складаються з домінуючою смуги з максимумом $\lambda_{max}=505$ нм і крила в короткохвильовій частині спектру, обумовленого смугою з $\lambda_{max}=460$ нм, відносна інтенсивність якої змінюється в залежності від N_{Cu} (рис. 1, криві 1,4,5). При $N_{Cu}=0$ і 2 ваг.% спектри зразків складаються практично з єдиної смуги з максимумами $\lambda_{max}=505$ нм та $\lambda_{max}=460$ нм, відповідно (рис. 1, криві 1, 5). При $N_{Cu}=0,2$ ваг.% (рис. 1, крива 3) смуги $\lambda_{max}=505$ і 460 нм складових спектр ФЛ, візуально мають рівну інтенсивність.

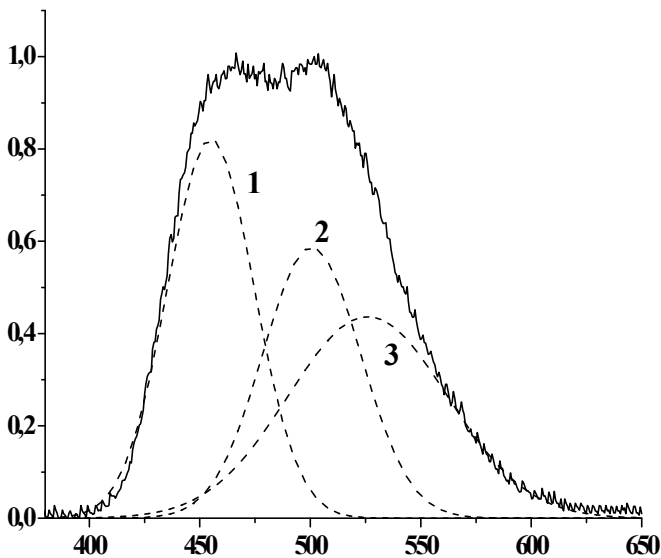


Рисунок 2 - Розкладання на складові спектру ФЛ ZnS, легованого міддю с концентрацією 0,2 %.

При аналізі серії спектрів ФЛ, представлених на рис. 1, була використувана процедура розкладання спектрів на індивідуальні смуги, запропонована в методі Алєнцева-Фока. Аналіз цих спектрів дозволив виділити три її складові - це смуги з $\lambda_{max} \sim 455, 503$ і 525 нм. В якості прикладу на рис. 2 надане таке розкладання спектра ФЛ зразка з концентрацією 0,2 ваг.%.

Як видно з рис. 1, для всіх зразків, для яких $N_{Cu} > 0,2$ ваг.%, довго-хвильове крило спектрів ФЛ аж до максимуму спектра збігаються. Це вказує на те, що зміна співвідношення інтенсивності смуг, складових даних спектрів, відбувається внаслідок лише зміни

відносній інтенсивності смуги, яка формує короткохвильову частину спектра, тобто зміни інтенсивності В-смуги відносно G-смуги. Як буде показано нижче, зміна відносної інтенсивності В-смуги залежно від N_{Cu} має нелінійний характер і добре корелює з даними ЕПР.

На рис. 3 (крива 1) показана залежність інтегральної інтенсивності спектру ЕПР від змісту введеної міді при $T=300$ К, а також (крива 2) співвідношення інтенсивностей компонент В- і G-смуг фотолюмінесценції в

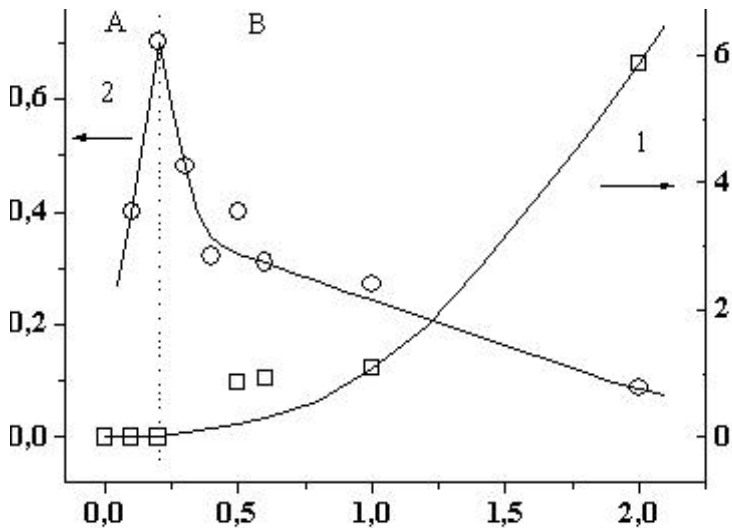


Рисунок 3 - Залежність інтенсивності ЕПР та відношення інтенсивності смуг ФЛ від концентрації міді

тенсивностей компонент (I_B/I_G) ФЛ починає падати з ростом N_{Cu} (область В на рис. 3), головним чином, за рахунок зменшення відносного внеску I_B . Одночасно з'являється і швидко наростає з ростом N_{Cu} сигнал ЕПР. З врахуванням порогового характеру його виникнення можна вважати, що природа спектра ЕПР обумовлена суттєвою кластеризацією іонів міді, яка реалізується в процесі синтезу при перевищенні певного значення концентрації введеної міді. Основну роль тут відіграє метод синтезу зразків.

Таким чином, на підставі вище наведених даних можна зробити висновок, що зміні концентрації введеної Cu при отриманні методом СВС ZnS:Cu, певна частина атомів міді крім формування випромінювальних центрів включають Cu^{2+} і Cu^+ , типу фази Cu_2S і CuS , бере участь у формуванні більш складних утворень. При $N_{Cu} > 0,3$ ваг.% Відбувається кластеризація іонів міді з утворенням комплексів, до складу яких входить велика кількість іонів міді. Останній процес має пороговий характер і проявляється як поява суперпарамагнітної підсистеми в досліджуваних матеріалах, експериментальним підтвердженням чого служить поява аномального сигналу ЕПР. Прояв магнітних властивостей наночастинок елементів немагнітних матеріалів Au, Ag і Cu ($d \sim 2-3$ нм) спостерігали [3] недавно та інтерпретували у зв'язку з фундаментальними питаннями магнетизму.

1. С.В. Козицький, В.П. Писарський, Д.Д. Поліщук, Фізика і хімія твердого тіла **4**, 749 (2003).
2. Yu.Yu. Bacherikov, I.P. Vorona, A.A. Konchits, S.V. Optasyuk, S.V. Kozytskyi, K.D. Kardashev, Functional Materials **17**, 1 (2010).
3. José S. Garitaonandia, Maite Insausti, Eider Goikolea, Motohiro Suzuki, John D. Cashion, Naomi Kawamura, Hitoshi Ohsawa, Izaskun Gil de Muro, Kiyonori Suzuki, Fernando Plazaola, Teofilo Rojo, Nano Lett., **8**, 661 (2008).

залежності від N_{Cu} . Видно, що є принципова відмінність в поведінці системи ZnS:Cu при низьких і високих значеннях N_{Cu} . При малих N_{Cu} (область А на рис. 3) величина (I_B/I_G) ФЛ зростає з ростом N_{Cu} і досягає максимуму при $N_{Cu} \approx 0,2$ ваг.%. Це зростання відбувається, головним чином, за рахунок збільшення відносного числа центрів випромінювання, відповідальних за В-смугу.

При подальшому підвищенні N_{Cu} ситуація різко змінюється. Відношення ін-

Олег Оліх

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
 м. Київ, Україна*

ВПЛИВ УЛЬТРАЗВУКУ НА ТЕРМОЕМІСІЙНІ ПРОЦЕСИ В Mo/n-n⁺-Si СТРУКТУРАХ

В останні роки достатньо широка увага приділяється дослідженню можливості використання акустичних хвиль як активного інструменту впливу на характеристики напівпровідникових приладів. Наприклад, було виявлено, що ультразвук (УЗ) може викликати зміни властивостей бар'єрних напівпровідникових приладів, зокрема структур з бар'єром Шотки [1-3]. Зауважимо, що переважна більшість робіт у цьому напрямі присвячена залишковим ефектам дії УЗ, що з'являються в результаті тривалого та потужного акустичного впливу. Проте більш перспективним для практичного застосування з точки зору створення пристроїв функціональної електроніки є використання УЗ для оборотної зміни властивостей пристроїв під час їх роботи. На жаль, роботи, де вивчаються акусто-динамічні ефекти в діодах Шотки (ДШ) практично відсутні.

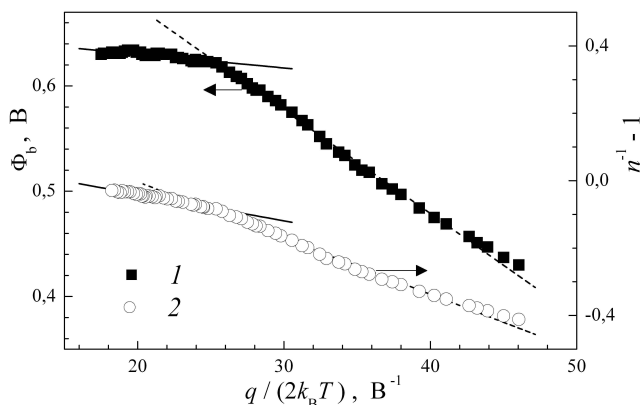


Рисунок 1 - Залежність величин Φ_b (1) та $(n^{-1} - 1)$ (2) від оберненої температури. Точки – експеримент, лінії – лінійна апроксимація в діапазонах 230–330 К та 120–220 К.

Досліджувані структури склалися з підкладки n^+ -Si:Sb (КЭС 0,01) товщиною 250 мкм та епітаксійного шару n -Si:P (концентрація носіїв $N_D = 1,3 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$, товщина 0,2 мкм), на поверхні якого шляхом нанесення шару молібдену створено контакт Шотки діаметром 2 мм. В роботі проводилися виміри вольт-амперних характеристик (ВАХ) ДШ в діапазоні температур 120-330 К та в умовах УЗ навантаження (УЗН) при кімнатній температурі.

При УЗН в зразках збуджувалися повздовжні хвилі з частотою $f_{us} = 9,6 \text{ МГц}$ та інтенсивністю $W_{us} < 0,7 \text{ Вт/см}^2$. Для визначення таких параметрів ДШ, як струм насичення I_s , висота бар'єру Шотки (ВБШ) Φ_b та фактор неідеальності n прями ділянки ВАХ апроксимувалися за формулою

$$I = I_s \exp\left(\frac{q(V - IR_s)}{nk_B T}\right) \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{q(V - IR_s)}{k_B T}\right)\right], \quad (1)$$

де $I_s = AA^* T^2 \exp(-q\Phi_b / k_B T)$, R_s – послідовний опір, A – площа контакту, A^* - ефективна стала Річардсона.

На рис. 1 наведено отримані температурні залежності Φ_b та n . Подібні результати знаходять своє пояснення в темках теорії неоднорідного контакту бар'єру Шотки [4], згідно з якою мають виконуватися наступні співвідношення:

$$\Phi_b = \Phi_b^0 - q\sigma_\Phi^2 / (2k_B T), \quad (2)$$

$$(n^{-1} - 1) = \rho_2 - q\rho_3 / (2k_B T), \quad (3)$$

де Φ_b^0 – середнє значення ВБШ, σ_Φ – стандартне відхилення ВБШ, величина, що характеризує однорідність контакту, ρ_2 та ρ_3 – параметри, що описують зміну розподілу ВБШ при зміщенні.

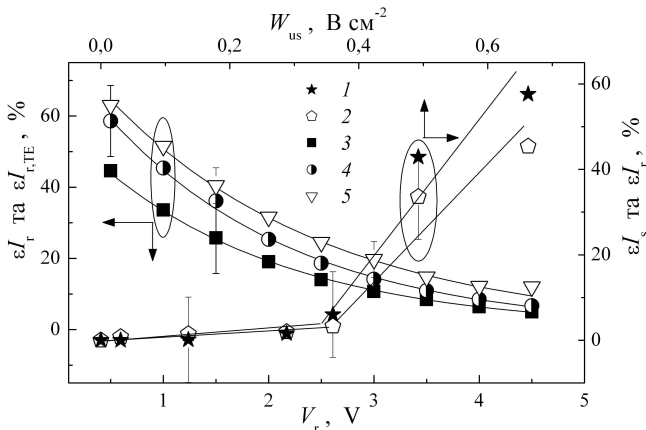


Рисунок 2 - Залежності відносних АІ змін струму насичення (I) та зворотнього струму при $V_r = 1$ В (2) від інтенсивності УЗН, а також залежності відносних АІ змін зворотнього струму (3, 4) та парціального внеску термоемісійної компоненти (5) від зворотнього зміщення. $W_{us}, Вт/см^2$: 3 - 0.49, 4 - 0.66. $f_{us} = 9.6$ МГц, $T = 296$ К.

метал-напівпровідник.

Аналіз температурних залежностей ВАХ показав, що зворотній струм I_r містить як термоемісійну складову $I_{r, TE}$, так і тунельну $I_{r, tun}$:

$$I_r(T, V_r = const) = I_{r, TE} + I_{r, tun} = CT^2 \exp[-E_r / (k_B T)] + I_{r, tun}. \quad (4)$$

Під дією УЗ зворотній струм зростає, причому амплітудні залежності зміни I_r дуже близькі до залежностей струму насичення – рис. 2. Крім того, при зміні зміщення V_r подібним один до одного чином змінюються величини АІ відносної зміни I_r та парціального внеску $I_{r, TE}$ (рис. 2, криві 3-5). Отже, причиною зміни зворотнього струму є зменшення ВБШ, в той час як на тунельну складову УЗН не впливає.

Експериментально виявлено, що в умовах УЗН відбувається зменшення ВБШ, яке досягає 13 мВ при $W_{us} \approx 0,66$ Вт/см². Ефект спостерігається при УЗН з $W_{us} > 0.35$ Вт/см². Зміна ВБШ має оборотній характер, значення параметру відновлюється приблизно через 10 хв після припинення УЗ впливу. Водночас встановлено, що величина фактору неідеальності при УЗН практично не змінюється. Як показують розрахунки, останнє свідчить про те, що УЗ модифікує величину саме Φ_b^0 , не впливаючи на σ_Φ . Причиною цього може бути акустоіндукована (АІ) іонізація дефектів, розташованих на границі

Таким чином, в даній роботі експериментально досліджено вплив УЗН при кімнатній температурі на параметри ДШ. Виявлено, що при поширенні акустичних хвиль спостерігаються оборотні зменшення ВБШ та збільшення зворотнього струму. Показано, що для УЗ дії характерна вибірковість впливу на різні компоненти зворотного струму.

1. О.Я.Олих, Т.Н. Пинчук, ПЖТФ, **32**, 22 (2006).
2. М.В. Тагаєв, Укр. фіз. журн., **45**, 364 (2000).
3. И.Г. Пашаєв, ФТП, **46**, 1108 (2012).
4. J.H. Werner, H.H. Guttler, J. Appl. Phys. **69**, 1522 (1991).

УДК 621.315.592, 534.2

Микола Тимочко, Олександр Лоцько, Ярослав Оліх
*Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України,
м. Київ, Україна*

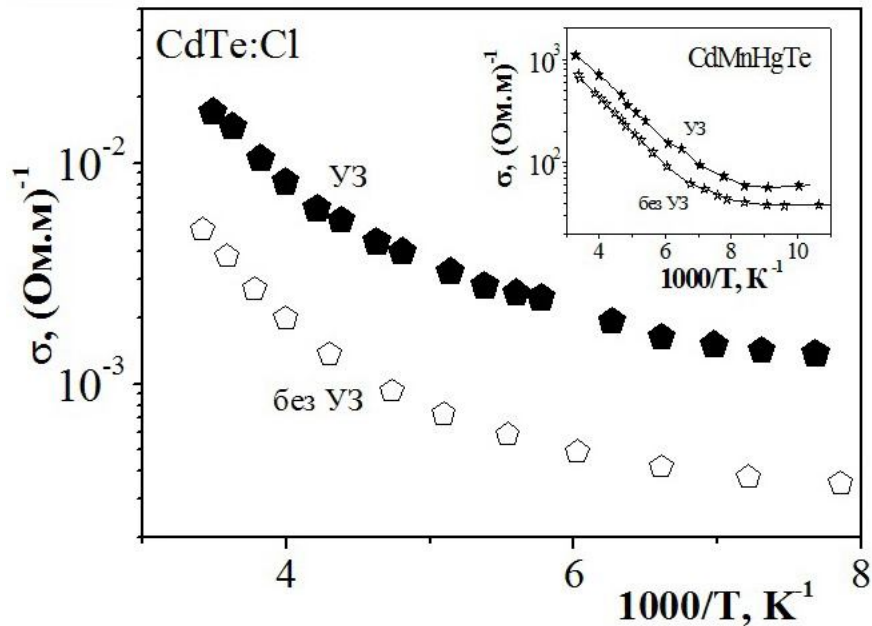
ВПЛИВ УЛЬТРАЗВУКОВОГО НАВАНТАЖЕННЯ НА ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ МОНОКРИСТАЛІВ CdTe:Cl

Монокристали телуриду кадмію використовуються у виробництві детекторів та детекторних систем X та γ -випромінювань для радіаційного моніторингу навколишнього середовища [1]. Впродовж останніх десятиліть проводиться дослідження впливів зовнішніх енергетичних чинників на властивості таких напівпровідникових сполук. До активних зовнішніх обробок можна віднести γ -опромінення, термічний відпал, обробку у водні, НВЧ-опромінення [2], ультразвукову (УЗ) обробку [3] та інші види впливу. Вплив таких зовнішніх чинників може призводити до трансформації домішково-дефектних комплексів досліджуваного матеріалу та відповідної зміни його електричних властивостей.

У даній роботі проведено дослідження впливу ультразвуку на електропровідність монокристалічних зразків CdTe:Cl ($N_{Cl}=5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$). Формування омичних контактів здійснювалось методом термовакуумного напилення за температури 175°C [4]. На першому етапі досліджень зразків CdTe:Cl було проведено тривалу УЗ обробку (60÷150 хв за 320 К на частоті 5÷15 МГц). Але результатів впливу УЗ не виявлено, що може бути пов'язано з надзвичайно швидкими процесами зворотної релаксації дефектної системи кристалів CdTe:Cl до вихідного стану після УЗ обробки. Зауважимо, що вплив подібної УЗ обробки γ -опромінених зразків Si залишався помітним протягом декількох діб і пояснювався дифузійними процесами акустоіндукованої перебудови дефектних комплексів кристалу та їх термодинамічного відновлення до рівноваги [5]. Подібна УЗ обробка інших напівпровідникових сполук – твердих розчинів CdMnHgTe – взагалі викликала залишкові та незворотні зміни електрофізичних характеристик, що, як виявилось, пов'язано з акустостимульованою міграцією атомів ртуті до поверхні зразка [6]. Відомо також, що інтенсивна УЗ обробка зразків CdTe:V теж могла викликати залишкове збільшення фоточутливості матеріалу, яке пояснювалося акустостимульованими процесами дисоціації комплексних дефектів ванадію та дифузії їх компонент до поверхні [3].

При наступних дослідженнях вимірювання електрофізичних характеристик кристалів CdTe:Cl відбувалося в процесі (*in-situ*) дії УЗ навантаження. На рисунку подано результати такого динамічного впливу УЗ навантаження; для порівняння на вставці зображено подібні результати, які отримані для зразка CdMnHgTe [6]. Зауважимо, що динамічні зміни електропровідності під час УЗ навантаження зворотні, і після вимкнення УЗ електрофізичні характеристики повертаються до вихідного стану (без дії УЗ навантаження). З рисунку видно, що під впливом УЗ навантаження зростає величина електропровідності в 3÷4

рази за кімнатних та майже на порядок за низьких температур. У випадку кристалів CdMnHgTe такі зміни пояснювались акустостимульованою генерацією пари ($\text{Hg} - V_{\text{Hg}}$) та її наступною рекомбінацією після вимкнення УЗ.



Таким чином, було встановлено що УЗ навантаження кристалів CdTe:Cl призводить до збільшення електропровідності внаслідок перетворення дефектних комплексів, пов'язаних з Cl та власними дефектами кристалу.

1. Д.В. Корбутяк, С.В. Мельничук, Є.В. Корбут, М.М. Борисик, *Телурид кадмію: домішково-дефектні стани та детекторні властивості* (Іван Федоров, Київ, 2000), 198 с.
2. А.Е. Беляєв, Р.В. Конакова, В.Г. Миленин и др., *ЖТФ* **68**, 49 (1998).
3. Л. А. Міщенко Вплив домішки ванадію на дефектоутворення в телуриді кадмію : автореф. дис. на здобуття наук. ступеня канд. фіз.-мат. наук : спец. 01.04.07 "Фізика твердого тіла" / Л. А. Міщенко. –К., 1998. – 15 с.
4. В.І. Хіврич *Ефекти компенсації та проникаючої радіації в монокристалах CdTe*, (Ін-т ядерних досл., Київ, 2010), 122 с.
5. Я. М. Оліх, Н. Д. Тимочко, А. П. Долголенко, *Письма в ЖТФ* **32**, 67 (2006).
6. Я. М. Оліх, С. Е. Остапов, Н. Д. Тимочко, *Укр. фіз. журн.* **50**, 1145 (2005).

УДК 621.315.592

С.В. Луцьов, О.В. Бурбан, П.Ф. Назарчук

*Луцький національний технічний університет,
м. Луцьк, Україна*

ВПЛИВ ІНВЕРСІЇ ТИПУ ($L_1 - \Delta_1$) АБСОЛЮТНОГО МІНІМУМУ НА ТЕНЗОЧУТЛИВІСТЬ КРИСТАЛІВ ГЕРМАНІЮ

Розвиток автоматики та сенсорної техніки, які зараз активно розвиваються, вимагає отримання як нових перспективних матеріалів, так і вдосконалення та вивчення необхідних властивостей тих, які використовуються. Такий напівпровідниковий матеріал, як германій, незважаючи на досить широке практичне використання та всебічну вивченість його властивостей, і надалі залишається бути в багатьох випадках перспективним матеріалом для створення різного роду приладів та сенсорів. Зонна структура германію має багатодолинний характер. Найнижчими (основними мінімумами) за шкалою енергій є в $n\text{-Ge}$ 4 мінімуми із симетрією L_1 , які беруть участь в різних кінетичних та оптичних ефектах та визначають роботу багатьох електронних приладів, в яких використовується германій. Тому параметри даних мінімумів на сьогодні є достатньо добре вивченими. Вище за шкалою енергій на $0,14\text{ eV}$ знаходиться один мінімум із симетрією Γ_2 і на $0,18\text{ eV}$ шість мінімумів із симетрією Δ_1 . Найвищий мінімум (Γ_{15}) знаходиться на відстані приблизно $2,5\text{ eV}$. Значна віддаленість даних мінімумів від основних як за енергією, так і за квазіімпульсом не сприяла дослідженням впливу їх при малих фізичних збуреннях на властивості матеріалу. Але в екстремальних умовах направленої дії значних електричних, деформаційних, оптичних та температурних полів дані мінімуми можуть вносити суттєвий вклад, а то й визначальний у відповідні ефекти. А це в свою чергу відкриває перспективи створення на основі германію різного роду електронних приладів та датчиків, які можуть працювати в таких екстремальних умовах. Наприклад, в роботі [1] було показано, що інверсію $L_1 - \Delta_1$ – типу абсолютного мінімуму можна реалізувати при гідростатичному тиску порядку 4 ГПа і одновісних тисках $X \approx 2,8\text{ ГПа}$, коли $X // J // [100]$, та $X \approx 8\text{ ГПа}$, коли $X // J // [110]$ [2]. При цьому для випадку гідростатичного тиску можна отримати шестиеліпсоїдну Δ_1 -модель зони провідності кристалів $n\text{-Ge}$, а при одновісному тискові – двохеліпсоїдну або чотирьохеліпсоїдну. Як в першому, так і в другому випадках така інверсія буде впливати на енергетичний спектр локальних енергетичних рівнів в забороненій зоні, на ефект екранування та змінювати характер розсіяння носіїв заряду.

Для оцінки впливу інверсії типу $L_1 - \Delta_1$, на зміну електричних властивостей даного матеріалу нами на основі теорії анізотропного розсіяння [3] з врахуванням знайдених нами раніше компонент тензора ефективної маси [4] та констант деформаційного потенціалу [2] були проведені розрахунки рухливості носіїв заряду та коефіцієнта тензоочутливості для різної концентрації домішки.

Ми обмежились при цьому випадком невиродженого електронного газу та розсіюванням електронів на акустичних фононах та іонах домішки. При цьому одержанні результати будуть справедливими для кристалів достатньо високої чистоти з відносно малими концентраціями електронів, а тому можна буде знехтувати також електрон – електронним розсіюванням.

Як показують розрахунки максимальне значення коефіцієнта тензочутливості можна досягнути при інверсії типу $(L_1 - \Delta_1)$ абсолютного мінімуму, яка обумовлена одновісним тиском кристалів *n-Ge* вздовж кристалографічного напрямку $[100]$. Це пояснюється тим, що такого типу інверсія призводить до суттєвого зменшення рухливості носіїв заряду, яке пов’язано, перш за все, зменшенням часу релаксації, оскільки ефективні маси для електронів різних мінімумів мало відрізняються.

Отриманні результати можуть бути використанні для конструювання сенсорів тиску, які працюватимуть в таких деформаційних полях, коли вже традиційний ефект п’єзоопору Сміта – Херрінга відсутній.

1. С. Ahmad, A. Adams, G.J. Pitt Ahmad, J. Phys. C: Sol. State Phys. **12**, 1379 (1979).
2. С.В. Луньов, П.Ф. Назарчук, О.В. Бурбан, *Релаксаційні, нелінійні й акустооптичні процеси та матеріали РНАОПМ'2012* (Матер. 6-ої Міжнар. наук. конф., м. Луцьк, 25–29 травня 2012 р.), с.42–45.
3. П.И. Баранский, И.С. Буда, И.В. Даховский, В.В. Колomoец, *Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках* (Наукова думка, Київ, 1977).
4. С.В. Луньов, П.Ф. Назарчук, Л.І. Панасюк, *Тези доповідей V Української наукової конференції з фізики напівпровідників УНКФН-5* (м. Ужгород, 9 – 15 жовтня 2011 р.), с. 249.

УДК 539.67, 539.374

Гліб Петченко, Олександр Петченко

*Харківська національна академія міського господарства,
м. Харків, Україна*

ВИВЧЕННЯ ВПЛИВУ РЕНТГЕНІВСЬКОГО ОПРОМІНЕННЯ В ІНТЕРВАЛІ 0-1000 Р НА ДИНАМІЧНЕ ГАЛЬМУВАННЯ ДИСЛОКАЦІЙ У МОНОКРИСТАЛАХ LiF

Дана стаття є подальшим розвитком наших робіт [1-3], спрямованих на вивчення впливу рентгенівського опромінення на перебіг динамічних дислокаційних процесів у монокристалах LiF. Вказані кристали мають високу температуру Дебая і тому для них при кімнатній температурі є можливість досліджувати ефекти закріплення дислокацій радіаційними дефектами у чистому вигляді, оскільки релаксаційні процеси не активізуються. У роботах [1-3] імпульсним методом частотного діапазону 7,5 – 232,5 МГц нами було вивчено вплив незначних доз рентгенівського опромінення (0-400 Р) на поведінку частотних спектрів дислокаційного поглинання ультразвуку для зразків LiF із значеннями залишкової деформації 0,3% [1], 0,4% [2] і 1,5% [3]. Незважаючи на незначну ступінь рентгенізації зразків ми відзначили помітне скорочення середньої ефективної довжини дислокаційного сегмента L внаслідок взаємодії рухливих дислокацій з дефектами радіаційного походження. Такий результат вдалося одержати через високу чутливість згасання ультразвуку α до незначних змін L ($\alpha \sim L^4$) [4]. Відомо, що для реєстрації і ідентифікації радіаційних дефектів досить інформативним і розповсюдженим методом є оптичний метод [5], сутність якого полягає у вимірюванні залежності спектрального коефіцієнта поглинання від довжини хвилі випромінювання, що проходить через кристал. Однак, незважаючи на безсумнівні переваги вказаного методу його практична реалізація потребує досить значних доз опромінення (як показали наші попередні дослідження опромінених кристалів на спектрофотометрі СФ-26, принаймні $\sim 10^3$ Р) для появи у кристалах центрів забарвлення.

Враховуючи вказане, ми поставили за мету простежити зміни дислокаційних характеристик кристалів у розширеному діапазоні доз опромінення 0 - 1000 Р, що дало б можливість одночасно сфокусувати методи фізичної акустики і оптики на рішення спільної задачі – вивчення дефектів радіаційного походження у опромінених кристалах.

Для цього за імпульсним методом в діапазоні частот 37,5 – 232,5 МГц при $T=300$ К, нами вивчалась поведінка частотних спектрів дислокаційного поглинання ультразвуку в монокристалах LiF із залишковою деформацією 0,4%, які опромінювали рентгенівськими променями на стандартній установці УРС-55 ($U=10$ кВ, $I=10$ мА). Потужність дози опромінення при такому режимі рентгенівської установки становила 0,11 рентген/с. Досліджувані кристали являли собою монокристалічні зразки з орієнтацією $\langle 100 \rangle$ і розміром $17 \times 17 \times 29$ мм³. Для забезпечення високої точності акустичного експерименту зразки

шліфувались і полірувались таким чином, щоб непаралельність їх робочих поверхонь не перевищувала $\pm 1\text{мкм/см}$. Точність механічної обробки та лінійні розміри зразків контролювалась за допомогою оптиметра типу ІКВ та компаратора ІЗА-2 відповідно. Для усунення внутрішніх напружень, які могли виникнути в результаті механічної обробки, дослідні зразки відпалювали у муфельній печі МП-2УМ протягом ~ 12 годин при температурі $T \sim 0,8 T_{\text{пл}}$ (де $T_{\text{пл}}$ – температура плавлення) з подальшим повільним охолодженням їх разом з піччю до кімнатної температури. Попередню деформацію зразків здійснювали за методом низькошвидкісної пластичної деформації на машині типу “Інстрон” при швидкості деформування $\sim 10^{-5}\text{с}^{-1}$ шляхом їх стискання вздовж кристалографічного напрямку $\langle 100 \rangle$. Зазначений метод забезпечує формування рівномірного розподілу фігур травлення по поверхні кристала, що гарантує достатньо високу точність підрахунку густини дислокацій Λ , необхідної для розрахунку коефіцієнта в’язкості B . Для надійного отримання потрібної залишкової деформації розрахунковий час деформування чітко визначався з моменту досягнення границі плинності, що контролювалось за допомогою самописця КСП-4.

Після дослідів ми прийшли до таких результатів. При збільшенні часу витримки кристалів t під рентгенівським опроміненням в інтервалі 0 - 160 хвилин (що відповідає загальній дозі опромінення ~ 1000 рентген) спостерігається помітне монотонне зміщення параметрів резонансного максимуму. При цьому резонансна частота f_m поступово збільшувалась, а значення максимального дислокаційного декременту Δ_m , навпаки, зменшувалось. У результаті ретельної обробки експериментальних даних і подальшого їх аналізу з’ясувалось, що зміна з часом опромінення локалізації частотних спектрів дислокаційного поглинання ультразвуку зумовлена монотонним зменшенням середньої ефективної довжини дислокаційного сегменту L , пов’язаним з обмеженням коливального руху дислокаційних петель у полі УЗ-хвилі через появу на дислокаціях додаткових центрів закріплення - радіаційних дефектів. Одержані експериментальні залежності $\Delta_m(t)$, $f_m(t)$ та $L(t)$ було порівняно з теоретичними розрахунками, виконаними в рамках моделі Штерна и Гранато [6] в результаті чого можна відзначити добре узгодження експериментальних і теоретичних даних. Що ж стосується інших дислокаційних характеристик, зокрема густини дислокацій Λ та константи динамічного гальмування B , то їх значення після опромінення залишались незмінними. Незалежність від часу опромінення величини B є додатковим підтвердженням висновку авторів [7] про те, що коефіцієнт динамічного гальмування дислокацій B є фундаментальною характеристикою кристала, що визначається лише взаємодією дислокацій з фононною підсистемою кристала, и не залежить від параметрів його дислокаційної структури.

1. G.A. Petchenko, A.M.Petchenko, *Functional Materials* **17**, 421 (2010).
2. Г.А. Петченко, *Вопросы атомной науки и техники* **78**, 36 (2012).
3. Г.О. Петченко, *Укр. фіз. журн.* **56**, 340 (2011).

4. Р. Труэлл, Ч. Эльбаум, Б. Чик, *Ультразвуковые методы в физике твердого тела* (Мир, Москва, 1972).
5. A. Smakula, *Z. Physik* **59**, 603 (1930).
6. Р.М. Штерн, А.В. Гранато, в сб. *Внутреннее трение и дефекты в металлах*: под ред. В.С. Постникова (Металлургия, Москва, 1965).
7. В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом, *УФН* **115**, 3 (1975).

УДК 537.311.322

Руслан Гуль¹, Павло Лісняк²

¹Тернопільський національний технічний університет ім. І. Пулюя,
м. Тернопіль, Україна

²Бережанський агротехнічний інститут,
м. Бережани, Україна

ВПЛИВ ПАРІВ ЕФІРУ НА ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ПАРАМЕТРИ ГЕТЕРОСТРУКТУР SnO₂–n–Si.

В даній роботі наведено результати досліджень впливу насичених парів ефіру на електрофізичні властивості контактів SnO₂–n–Si. Контакти диоксид олова-n-кремній отримано шляхом окиснення плівки олова, яку наносили на пластину кремнію шляхом термічного розпорошення олова у вакуумній камері. Після нанесення плівку відпалювали в кисневій атмосфері, внаслідок чого плівка окислювалась і утворювався диоксид олова. Пластини кремнію товщиною 300 мкм виготовлялись із кремнію КЕФ, питомий опір якого становив 0,3 Ом см і були орієнтовані гранню <111>. Омичним контактом служила індій-галієва паста, а контактом з диоксидом олова служив притиснутий залізний зонд. Описаним вище методом було виготовлено зразки з товщиною плівки 20, 40, 60, 80 і 100 нм. Експериментально вивчались вольт-амперні характеристики та вольт-фарадні характеристики вказаних п'яти груп контактів як до дії, так і після дії на них насиченої пари ефіру.

Дослідження впливу газового середовища на поверхнево-бар'єрні структури проводилось за такою схемою: контакти SnO₂–n–Si з товщиною плівки 20 нм, 40 нм, 60 нм, 80 нм і 100 нм поміщались в герметичну камеру, в якій знаходилось повітря, тиск якого дорівнював атмосферному тиску. Після цього вимірювались вольт-амперні (ВАХ) та вольт-фарадні (С-V) характеристики. По завершенні вимірювань в камеру вводилась невелика кількість ефіру, який, випаровуючись, утворював насичену пару. Після утворення суміші атмосферного повітря і насиченої пари ефіру зразок витримувався в камері близько 30 хв. і після цього вимірювались ВАХ та С-V характеристики.

На рисунку 1 показано типову ВАХ контактів SnO₂–Si (товщина плівки оксиду становила 20 нм), виміряну при кімнатній температурі, коли зразок містився:

- 1) у звичайній атмосфері (крива 1);
- 2) в атмосфері, що містить насичену пару ефіру (крива 2).

Як видно із малюнка, пряма гілка ВАХ під дією парів ефіру не змінюється, а зворотний струм зростає. Із зростанням зворотної напруги вплив пари ефіру посилюється. Наприклад, якщо під дією пари ефіру сила зворотного струму зростає в 1,4 рази, коли до зразка прикладена напруга 1 В, то коли до зразка прикласти напругу 3В, сила струму зростає в 1,7 рази.

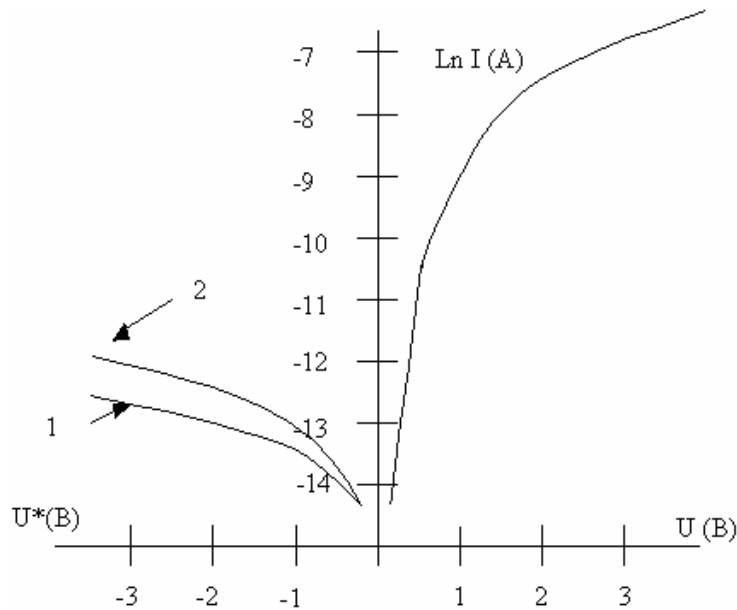


Рисунок 1 - Типові залежності ВАХ контактів SnO₂ – n – Si для товщини плівки h=20 нм у звичайній атмосфері (крива 1) і в атмосфері, що містить насичену пару ефіру (крива 2)

Це говорить про те, що ефект впливу пари ефіру зростає із збільшенням зворотної напруги. Параметр ВАХ α визначається за формулою $\alpha = \frac{d \ln I}{dV}$, не змінювався, а параметр α^* , що визначається за формулою $\alpha^* = \frac{d \ln I^*}{dV^*}$ - змінювався.

Дослідження залежності зміни зворотного струму під дією пари ефіру від товщини шару оксиду показали, що ефективність впливу насиченої пари на параметри ВАХ залежать від товщини плівки оксиду.

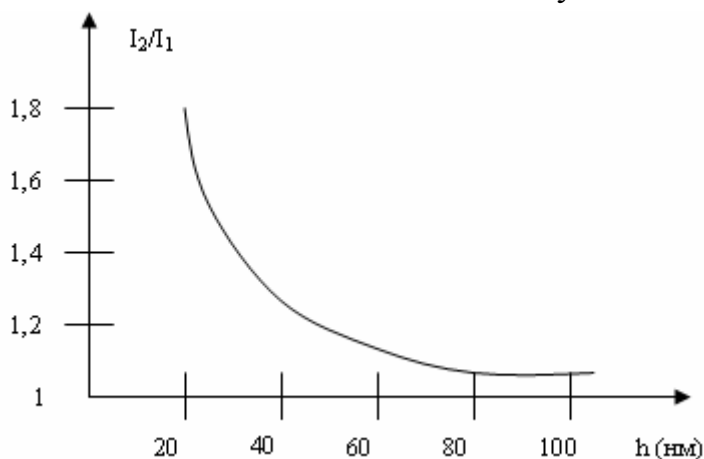


Рисунок 2 - Залежність зміни сили струму від товщини плівки оксиду олова.

На рис. 2 показано залежність зміни сили струму від товщини плівки, якщо напруга зміщення становила 3В. Як видно із малюнка, із зростанням товщини плівки відносна зміна струму зменшується внаслідок зростання товщини плівки, і коли товщина плівки досягає товщини 80 нм ($h \geq 80$ нм), впливу пари

ефіру на ВАХ не спостерігається. Із отриманих результатів можна зробити припущення про те, що із зменшенням товщини плівки ($h < 20$ нм) діоксиду металу ефективність впливу пари ефіру буде зростати.

Вимірювання вольт-фарадних характеристик проводилось на частоті 1 МГц за допомогою приладу С7-12. Як показали дослідження електроємність контактних структур, які знаходились у звичайній атмосфері, монотонно зростала і досягала насичення внаслідок прикладання прямої напруги і монотонно спадала під дією зворотної напруги.

Аналогічні зміни електроємності під дією прикладеної напруги спостерігалися і у випадку, коли досліджувані зразки знаходились в атмосфері, забрудненій насиченою парою і ефіром, але електроємність цих структур була трохи меншою. Зменшення електроємності обумовлювалось товщиною плівки діоксиду олова. Із зростанням товщини плівки відносно зміни електроємності зменшувалась.

Із вольт-фарадних характеристик визначалась висота потенціального бар'єру та параметр перехідного шару d/ε за методикою, розробленою в [1].

$$\left(\frac{dV_2}{dV_1}\right)^2 = \left(\frac{C_1 - C}{C}\right)^2 = 8(en_0\varepsilon_0\varepsilon_2)^{-1} \left(\frac{d}{\varepsilon\varepsilon_1}\right)^{-1} (\varphi_0 - eV_2)$$
$$V_2 = \frac{\varphi_0}{e} \cdot \left[\frac{1}{C_0} - \frac{1}{C_1}\right]^{-2} \left[\frac{1}{C_0} - \frac{1}{C}\right] \cdot \left[\frac{1}{C_0} + \frac{1}{C} - \frac{2}{C_1}\right],$$

$V_1 = V - V_2$, де C_0 – електроємність контакту при $V=0$.

Електроємність насичення C_1 досліджуваних структур під дією пари ефіру зменшувалась. Висота бар'єру φ_0 , визначена із залежності $\left(\frac{dV_2}{dV_1}\right)^2 = F(V_2)$,

становила 0.24 еВ і під дією пари ефіру зменшувалась на 0.08 еВ. Параметр перехідного шару d/ε , визначений для зразків, що знаходились у звичайній атмосфері, становив $5.7 \cdot 10^{-6}$ м, а для цих же зразків, які знаходились в атмосфері, яка містила насичену пару ефіру $1.2 \cdot 10^{-5}$ м.

Отримані результати показують що: досліджувані контакти змінюють свої електрофізичні параметри під дією пари ефіру; величина відгуку на дію оточуючого середовища (на пару ефіру) залежить від товщини плівки оксиду металу, із збільшенням товщини плівки величина відгуку зменшується; існує така товщина плівки, при якій досліджувані структури перестають бути чутливі до парів ефіру; спостережувані зміни ВАХ та $C-V$ –характеристик, можливо, пов'язані зі змінами параметрами перехідного шару d/ε , а сама зміна цього параметра, ймовірно, обумовлена змінами електричного заряду, який існує на поверхні перехідного шару.

1. Simon Sze, *Special Topics Semiconductor Sensors*, 576 pages
2. V.A. Vikulov, V.I. Strikha, V.A. Skryshevsku, S.S. Kilchitskaya, E. Souteyrand, J.-R. Martin. *Journal of physics D: Appl. Physics* **33**, 1957 S.S..

УДК 621.375.8

Л.Ф. Головка

*Національний технічний університет "Київський політехнічний інститут",
м. Київ, Україна*

НОВІТНІ ЛАЗЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ В ПОВЕРХНЕВІЙ ОБРОБЦІ МАТЕРІАЛІВ

Лазерне випромінювання є ефективним інструментом в інженерії поверхні, який дозволяє значно розширити можливості керування якістю поверхневих шарів різних конструкційних матеріалів, створювати на їхніх поверхнях нові композиційні матеріали з наперед заданими властивостями, проводити формоутворення виробів складної просторової форми шляхом пошарового їх вирощування з порошкових матеріалів, згинати, витягувати тонколистові матеріали за рахунок локального змінювання їх напруженого стану та інше.

Першу групу методів утворюють способи лазерної обробки, що приводять у результаті нагрівання до модифікування структури поверхневих шарів матеріалів, зміни напруженого стану окремих локальних ділянок. Вони реалізуються при різних температурах нагрівання - від температур, при яких у матеріалах формуються певні залишкові напруження, відбуваються пластична деформація чи структурно-фазові перетворення, до температур плавлення й навіть випаровування. Поряд з відомими способами поверхневої обробки (відпалом, відпусканням, загартуванням, аморфізацією) розроблено ряд нових цікавих і перспективних технологій, в основі яких лежать різні фізико-хімічні процеси.

Структури, що формуються в залізобуглецевих й інших сплавах при лазерному нагріванні й наступному надшвидкісному охолодженні, володіють рядом унікальних властивостей. До однієї з таких особливостей структур варто віднести те, що вони сприяють значному підвищенню адгезії металів, що наприклад склеюють. Дослідженнями встановлено, що, міцність зчеплення з'єднання "сталь-твердий сплав" зростає в 3-4 рази. Такий результат свідчить про великі можливості цієї технології.

Лазерне деформування слід віднести до нових технологій, пов'язаних зі створенням на окремих локальних ділянках виробів за допомогою лазерного нагрівання металургійних концентраторів напружень. Кероване створення на певних ділянках поверхні тонколистового виробу визначених за величиною, знаком та характером розподілу макронапружень, дозволяє проводити формоутворення різних просторових конструкцій. Це досягається зміною режимів опромінення, кількості циклів «нагрів-охолодження», траєкторії переміщення променя з урахуванням властивостей матеріалу. Таке формоутворення як простих, так і складних за формою металевих конструкцій, є гнучким, досить продуктивним і високоефективним процесом.

Дуже перспективною є й інша технологія цього напрямку - це створення в металевих матеріалах на певних ділянках конструкцій залишкових напруг, рівних за величиною й протилежних за знаком максимальним пружним напругам, які виникають на цих ділянках при дії робочих навантажень, обумовлених роботою деталі в складі виробу в процесі експлуатації. Такий спосіб впливу на напружений стан матеріалу конструкції дозволяє, залежно від пріоритету, підвищити чи її жорсткість, чи величину припустимих навантажень, знизити матеріалоємність виробу й ін.

Лазерне загартування ефективно там, де потрібні високі твердість і зносостійкість окремих найбільш навантажених ділянок поверхонь деталей. Ці якості забезпечуються за рахунок створення на поверхні виробу шару із загартованою структурою, що відрізняється від отриманої при звичайних способах об'ємного загартування. При лазерному загартуванні відбувається надшвидкісне нагрівання матеріалу до температур, що перевищують критичні точки. Завдяки локальності процесу нагрівання окремих об'ємів виробу, які оточені холодним металом з високою теплопровідністю, відбувається інтенсивне відведення тепла з швидкостями 10^5 - 10^6 °C/с, які набагато перевищують критичні. Внаслідок цього в зоні опромінення відбуваються фазові й структурні зміни: при нагріванні - утворення аустеніту та розчинення карбідних фаз, при охолодженні - перетворення аустеніту в мартенсит.

Іншим надзвичайно цікавим напрямком використання унікальних властивостей таких структур є інтенсифікація процесів хіміко-термічної обробки, таких як азотування, борування, цементация й ін. Інтенсифікувати процес хіміко-термічної обробки можна за рахунок збільшення дефектності кристалічної будови матеріалу, тобто збільшення густини дислокацій й ускладнення їхньої просторової конфігурації, що пов'язане зі здрібнюванням зерен і збільшенням протяжності їхніх границь, утворенням так званих "дислокаційних трубок". Оскільки структури, що утворюються після лазерної обробки, саме й мають такі особливості, то це й стало основою розробки нового способу комбінованої лазерної хіміко-термічної обробки, метою якої є істотне зменшення тривалості й енергоємності процесу, можливість селективної обробки окремих ділянок поверхні деталей при одночасному збільшенні товщини зміцненого шару й виключення деформації виробу. Сутність способу полягає в тім, що поверхня деталі, яку треба азотувати, попередньо піддається лазерному загартуванню, а потім проводиться хіміко-термічна обробка. Так, попереднє загартування вуглецевої сталі з наступним азотуванням у середовищі аміаку при температурі 800-860°С сприяє збільшенню глибини азотованого шару в зоні термічного впливу лазерного випромінювання в 3-4 рази (з 0,1мм до 0,46мм). При цьому значно підвищується дисперсність і мікротвердість структури. В азотованому шарі у вуглецевій сталі без попередньої лазерної обробки мікротвердість структури становить 3,5 ГПа, у шарі з лазерною обробкою - 8 ГПа.

Лазерне термодформаційне зміцнення поверхневих шарів конструкційних матеріалів становить великий інтерес для деталей, які

працюють в умовах тертя при дії циклічних знакозмінних навантажень. Воно полягає в тім, що після лазерного нагрівання, наприклад, сталі до температур аустенізації, нагрітий шар на етапі охолодження, в області температур 600-400°C піддається механічному пластичному деформуванню. Така комплексна обробка в результаті спадкоємних явищ сприяє формуванню високодисперсної структури, яка володіє великою твердістю й підвищеними пластичними властивостями, що дуже важливо, наприклад, для поверхонь вузлів тертя. Крім цього, така обробка забезпечує формування в поверхневих шарах гарантованих стискаючих залишкових макронапружень, що істотно розширює область застосування лазерного зміцнення для деталей, довговічність яких лімітується втомленою міцністю.

Лазерне загартуванні із рідкої фази, тобто при використанні режимів опромінення, які обумовлюють появу на поверхні виробу оплавленого металу, теж має певні галузі застосування. Хоча головним її недоліком є необхідність застосування, з метою надання опроміненним поверхням потрібної шорсткості, механічної обробки. У перегрітому металі домішки встигають розчинитися, якщо до цього вони втримувалися у вигляді включень. Оскільки час нагрівання, товщина розплавленого шару й ступінь прогрівання основного матеріалу дуже малі, охолодження при кристалізації рідкого шару відбувається з високою швидкістю - до 10^6 °C/с. Такі швидкості остигання приблизно в 10^3 раз більші швидкостей, характерних для звичайного загартування. У результаті утворюється мартенсит зі змістом вуглецю дещо більшим, ніж при традиційному загартуванні. При цьому виді обробки спостерігаються так звані "білі шари", які неодноразово відмічались при інших видах швидкісного нагрівання (електронним променем, електричним розрядом, плазмовою дугою, в умовах взаємодії пар тертя). Вони слабо травляться звичайними хімічними реактивами, мають високу поверхневу твердість, дрібну кристалеву субструктуру й можуть містити високотемпературні фази. Загартування металевих матеріалів із рідинної фази дозволяє суттєво перерозподілити легуючі елементи, виключити утворення скопищ різних домішок, наприклад скопищ кременю в силумінах, графіту – в чавунах, що забезпечує підвищення експлуатаційних характеристик виробів. Інколи цей спосіб можна досить ефективно використовувати для заліковування мікротріщин на поверхнях деталей.

Лазерне термоцикування – процес, при якому певна ділянка матеріалу піддається кільком термічним циклам «нагрів-охолодження». Різними дослідниками встановлено надзвичайно цікавий факт присутності при лазерному опроміненні різних сплавів істотного перерозподілу легуючих елементів і домішок, що протікає у твердій фазі зі швидкостями, які набагато перевищують швидкості, характерні для класичних механізмів дифузії. Дослідженнями встановлено, що лазерне опромінення легованих сталей та металевих сплавів з покриттями, отриманими плазмовим запиленням, ініціює досить ефективно масоперенесення, яке можна використовувати для локального мікролегування з метою надання окремим ділянкам виробів потрібних

властивостей, або підвищення міцності зчеплення покриттів, які тримаються за рахунок адгезії, з основою. Відомо, що газотермічні покриття маючи безліч позитивних якостей мають один істотний недолік - низьку міцність зчеплення покриття з основою, 200-300 МПа. Відомо також і те, що при імпульсних механічних або термічних впливах, у тому числі й лазерному, у металах, у твердій фазі спостерігається перерозподіл легуючих елементів, що має аномальний характер. Цей факт було запропоновано використати для утворення металургійного зв'язку між адгезійним покриттям й основою. Для цього явище аномального масоперенесення на границі покриття-основа ініціювалося циклічним лазерним нагріванням до температур, що не перевищували температуру плавлення. У результаті лазерного термоцикування елементи покриття проникають в основу, а елементи основи - у покриття, що залежить від їх характеристик, концентрації у базовому і контактуючому матеріалах, від температурних умов нагрівання. Але внаслідок цього між покриттям і основою утворюється металургійний зв'язок і підвищується міцність їх зчеплення з 200 до 1300 МПа. До того ж лазерне термоцикування сприяє істотному зниженню пористості газотермічних покриттів з 8-10% до 2-3% і підвищенню їхньої пластичності. Застосування лазерного термоцикування дозволяє значно покращити якість газотермічних покриттів, розширити область їхнього застосування.

Лазерне поверхнєве легування здійснюється шляхом введення в задані ділянки поверхні різних компонентів, які, змішуючись із матеріалом основи, утворюють тверді розчини, хімічні сполуки або композиції необхідного складу. При цьому обов'язковою умовою є збереження в оброблених лазером ділянках поверхонь значної кількості матеріалу основи.

Одна з розповсюджених технологічних схем процесу лазерного легування – це оплавлення визначених ділянок матеріалу основи і подача в утворений розплав легуючих елементів. Легуючі елементи можуть вводитись в розплав із попередньо нанесеного шару, із газового або рідинного оточуючого середовища, інжекцією порошкового матеріалу (вдуванням в розплав порошкових легуючих елементів транспортуючим газом), або подачею пастоподібної композиції. Легуючі елементи в ванні розплаву завдяки виникненню гідродинамічних потоків, обумовлених розподілом температур, механічно переміщуються з матеріалом основи. Паралельно в розплаві протікають і дифузійні процеси. Лазерне легування застосовується для надання визначеним ділянкам поверхонь виробів певних властивостей: високої твердості, корозійної стійкості, опірності зношуванню, теплостійкості і т. ін.

Лазерне наплавлення – спосіб нанесення функціональних покриттів, який здійснюється шляхом оплавлення матеріалу основи і порошкової суміші, яка наплавляється. Для розплавлення матеріалів застосовується частково розфокусоване або сфокусоване і скануюче лазерне випромінювання. Відмінною особливістю процесу є те, що матеріал основи оплавляється на мінімально можливу глибину (20-50 мкм), щоб тільки забезпечити металургійний зв'язок з покриттям і виключити, або звести до мінімуму, їх

взаємне перемішування. Нанесений таким чином шар повинен містити у своєму складі тільки матеріал, вибраний для наплавлення. Нарощування товщини покриття проводиться виключно за рахунок збільшення кількості матеріалу, що наплавляється. Доставка матеріалу покриття, як і при легуванні, здійснюється шляхом попереднього нанесення шару матеріалу, вибраного для наплавлення, або його примусовим введенням в зону дії лазерного променя.

Лазерне термодетформаційне спікання композиційних матеріалів є новим і надзвичайно перспективним процесом. Цим питанням займаються багато дослідників в різних країнах світу. Досліджується як твердофазне, так і рідкофазне спікання. Щодо першого напрямку, то цим питанням досить ґрунтовно займаються вчені Білоруської академії наук, які на сьогодні мають багато цікавих результатів. Більш практичні результати отримані в напрямку рідкофазного спікання. Одержання алмазовміщуючих інструментальних композиційних матеріалів за допомогою лазерного рідкофазного спікання є окремим, самостійним і важливим питанням. Цей напрямок запропонований і успішно розвивається спільно вченими НТУ "КПІ" і ІНМ НАН України. Результати експериментального вивчення впливу лазерного опромінення на якісні характеристики алмазів, на фізико-хімічні процеси, які відбуваються на границі "алмаз - зв'язка", показали, що існує певна область режимів спікання, при яких забезпечується збереження вихідної міцності алмазів. Поза її межами в алмазах спостерігається утворення тріщин, окислювання й інші негативні процеси. Лазерне випромінювання завдяки високій концентрації енергії й локальності процесу дозволяє при певній густині потужності швидко, за 0,2-0,4с, нагрівати певний шар металевого порошку до температур 1500-1600°C. Алмази при побічному нагріванні до таких температур розплавленою лазерним випромінюванням сумішшю порошків не втрачають своєї міцності, але за певних умов обробки. Це дозволяє проводити лазерне рідкофазне спікання композитів на основі широкої гами зв'язок як з легкоплавкими, так і тугоплавкими складовими. Подібні результати отримані і для композитів, вміщуючи кубічний нітрид бору.

Лазерно-дугове наплавлення дозволяє суттєво підвищити ефективність нанесення покриттів, спікання композитів. Це комбінований процес, при якому у процесі лазерного наплавлення, порошковий матеріал підігрівають до температури $0,9T_{пл}$, за допомогою прямої або побічної електричної дуги. Лазерний промінь у цьому випадку здійснює тільки оплавлення тонкого поверхневого шару основи й остаточне, фінішне, формування наплавленого валика. Даний процес дозволяє значно підвищити продуктивність спікання без істотного збільшення його вартості.

УДК 538.958, 538.955, 538.971

Микола Ткач, Ігор Бойко, Юлія Сеті

*Чернівецький національний університет імені Ю. Федьковича,
м. Чернівці, Україна*

ТЕОРІЯ АКТИВНОЇ ПРОВІДНОСТІ АКТИВНОЇ ЗОНИ КВАНТОВОГО КАСКАДНОГО ЛАЗЕРА У ПОПЕРЕЧНОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ

Створення квантових каскадних лазерів (ККЛ) [1], принцип роботи яких ґрунтується на квантових переходах між квазістаціонарними станами плоских резонансно-тунельних структур (РТС), дало поштовх інтенсифікації експериментальних та теоретичних досліджень у цьому напрямку.

Велике значення мають теоретичні роботи, в яких досліджується взаємодія електрона зі змінним у часі електромагнітним полем у моделях відкритих багатошарових РТС [2], оскільки такі моделі найбільш адекватно описують поведінку електрона у межах окремого каскаду [3].

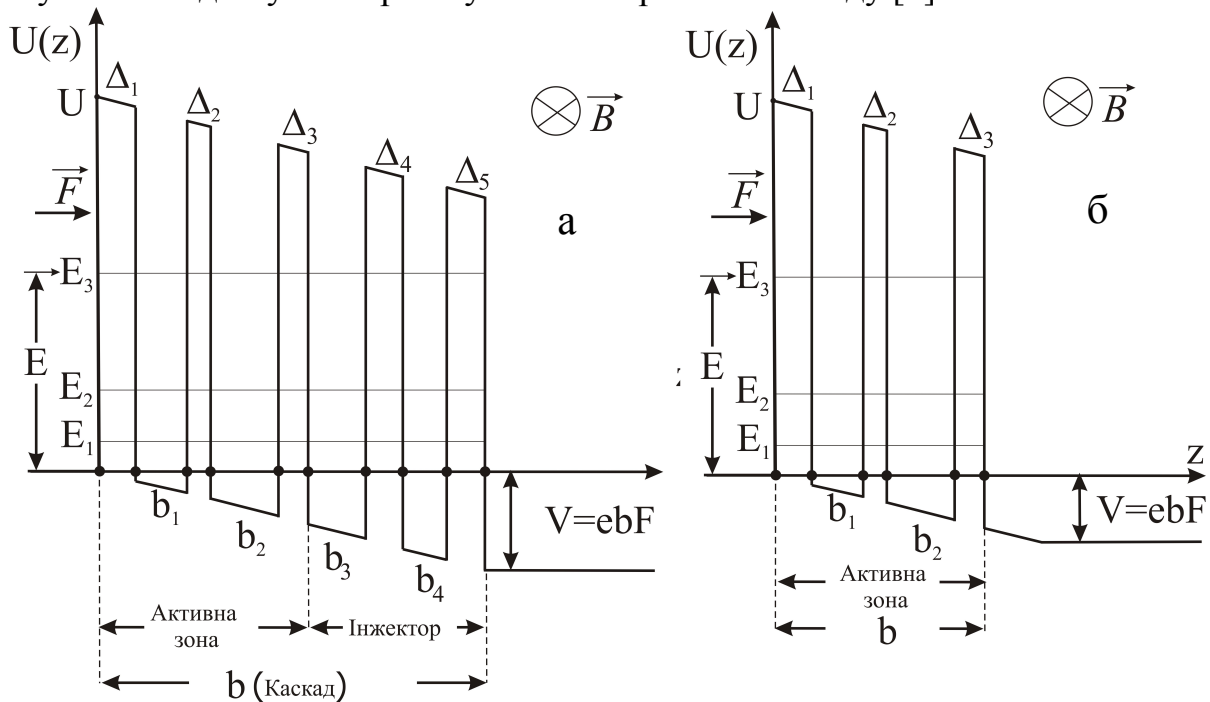


Рисунок 1 - Геометричні та енергетичні схеми окремого каскаду (а) та активної зони (б) квантового каскадного лазера.

Нові експериментальні роботи часто пов'язані з дослідженням впливу на роботу ККЛ та ККД постійних паралельних та перпендикулярних магнітних полів [4]. Випадок поперечного магнітного поля є складним як в експериментальному так і в теоретичному аспектах, оскільки в такому разі має місце накладання магнітної осциляторної складової на потенціали ям та гетеробар'єрів.

Перші експериментальні дослідження тунелювання електронів в поперечному магнітному полі було здійснено в роботі [4] для одно та

двобар’єрних РТС, ще близько 15 років тому. У той же час на базі апроксимацій вкладу магнітного поля [5] було виконано перші теоретичні оцінки для залежностей стаціонарного електронного спектру від величини прикладеного магнітного поля.

У першій експериментальній роботі [6], де досліджувався вплив поперечного магнітного поля на роботу ККЛ для інтерпретації експериментальних даних було використано теоретичні методи більш давніх робіт [5]. При цьому виявилось, що результати розрахунків повністю розходяться з експериментальними даними. Експериментальне дослідження спектру люмінесценції показало швидке зменшення інтегральної інтенсивності випромінювання, а також слабе блакитне зміщення її піка зі збільшенням величини магнітного поля, а розрахунок електронного спектру та матричних елементів квантових переходів навпаки, вказував на червоне зміщення і повільне згасання інтенсивності випромінювання.

У зв’язку із відсутністю послідовної теорії, яка б пояснювала результати експерименту, метою даної роботи є побудова теорії квазістаціонарних станів та активної електронної провідності електронів окремого каскаду ККЛ в поперечному магнітному полі.

У моделі ефективних мас та потенціальних прямокутних ям та бар’єрів розглядається трибар’єрна активна зона каскаду ККЛ (рис. 1). Перпендикулярно до площин шарів РТС прикладене постійне електричне поле напруженістю \vec{F} , а паралельно до них – постійне магнітне поле. Калібровку магнітного поля зручно вибрати у вигляді:

$$\vec{A} = (0, -Bz, 0) \quad (1)$$

Для розв’язання динамічної задачі руху електрона необхідно розв’язувати повне рівняння Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t} = (H_0(x, y, z) + H(x, y, z, t))\Psi(x, y, z, t), \quad (2)$$

де

$$H_0(x, y, z) = \frac{1}{2m(z)} \{p_x^2 + (p_y - eBz)^2 + p_z^2\} + U(z) - eF[z\theta(-z) + (d - z)\theta(z - d)] \quad (3)$$

- гамільтоніан електрона стаціонарної задачі, а

$$H(x, y, z, t) = -e\mathcal{E}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})[z\theta(-z) + (b - z)\theta(b - d)] \quad (4)$$

- гамільтоніан взаємодії електрона з змінним у часі електромагнітним полем напруженості \mathcal{E} .

У малосигнальному наближенні розв’язок рівняння (2) шукається у вигляді:

$$\Psi(x, y, z, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} \Phi(z, t), \quad (5)$$

де

$$\Phi(z, t) = \Phi(z) e^{-i\omega_0 t} + \Phi_+ e^{-i(\omega_0 + \omega)t} + \Phi_- e^{-i(\omega_0 - \omega)t}, \quad (6)$$

$\Phi(z)$ - розв’язок стаціонарної задачі.

Подальший розвиток теорії виконується за методом, викладеним в роботі [2]. З використанням умов неперервності хвильової функції на потоків її ймовірності на усіх гетерограницях наносистеми однозначно визначається хвильова функція $\Phi(z,t)$, що дає змогу знайти густину потоку $j(E,z)$, а отже і дійсну частину активної провідності σ , яка може бути представлена у вигляді двох складових

$$\sigma(\Omega, E) = \sigma^-(\Omega, E) + \sigma^+(\Omega, E). \quad (7)$$

Фізичний зміст парціальних складових ($\sigma^\pm(\Omega, E)$) полягає в тому, що вони зумовлені потоками електронів, які взаємодіючи з високочастотним електромагнітним полем в РТС, виходять з неї вперед (σ^+) і назад (σ^-) по відношенню до початкового напрямку руху.

Побудована теорія дала змогу проаналізувати залежності спектральних параметрів (резонансних енергій та ширин) електрона та активної динамічної провідності експериментально досліджуваного каскаду в залежності від величини прикладеного поперечного магнітного поля. Розрахована величина інтегральної активної провідності $\bar{\sigma}$ корелює з аналогічними експериментальними результатами дослідження спектра люмінесценції. Показано, що при збільшенні величини магнітного поля має місце блакитне зміщення, а при сильному магнітному полі активна провідність каскаду швидко зменшується.

1. J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, A. Y. Cho, *Science* **264**, 553 (1994).
2. N. V. Tkach, Yu. A. Seti, V. A. Matijek, I. V. Boyko. *Semiconductors* **46**, 376 (2012).
3. N. V. Tkach, Yu. A. Seti, *Condensed Matter Physics* **14**, 13701 (2011).
4. W. Zawadzki, *Seminond. Sci. Technol* **2**, 550 (1987).
5. J. M. Heisz and E. Zaremba, *Semicond. Sci. Technol* **8**, 575 (1993).
6. S. Blaser, L. Diehl, M. Beck, J. Faist, *Physica E* **7**, 33 (2000).

УДК 621.375.826:621

Л.Ф. Головко, М.С. Блощин

*Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут",
м. Київ, Україна*

ПІДВИЩЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ПРОЦЕСУ ЛАЗЕРНОГО ГАЗОПОРОШКОВОГО НАПЛАВЛЕННЯ ЗАСТОСУВАННЯМ ЕНЕРГІЇ ПЛАЗМОВОГО СТРУМЕНЯ

В різних галузях промисловості широко використовують машини, деталі яких працюють в екстремальних умовах. Внаслідок цього окремі ділянки таких деталей швидко зношуються, втрачаючи геометричну форму і розміри. Головним механізмом спрацювання таких виробів є абразивне зношування в умовах дії агресивного середовища, підвищених температур, високих питомих тисків, відсутності мастил або обмежених умов змащування. Надзвичайно ефективними способами подовження тривалості роботи таких виробів є застосування технологій зміцнення та відновлення.

Розглядається застосування плазмового струменя як додаткового джерела енергії для інтенсифікації процесу лазерного газопорошкового наплавлення з метою радикального підвищення його продуктивності і якості без істотного збільшення вартості. Наведено детальний теоретичний енергетичний аналіз процесу лазерного газопорошкового наплавлення, визначені найбільш енергоємні його складові для реалізації яких доцільно використати порівняно не дорогу енергію плазмового струменя. Повідомляються результати теоретичного й експериментального вивчення механізму лазерно-плазмового наплавлення при різних просторово - часових схемах використання двох різних теплових джерел.

Наведено дані про основні технологічні закономірності комбінованого процесу наплавлення, що відбивають зв'язок його основних факторів з вихідними параметрами.

Розроблено комбінований та диференційований, з розділеними функціями джерел енергії, процес лазерно-плазмового наплавлення і алгоритм розрахунку його технологічних параметрів. Визначено ефективну довжину плазмового струменя, проходячи яку порошок нагрівається до наперед заданої температури. Показано, що при такій схемі лазерно-плазмового наплавлення, кінцевий його результат при оптимальних умовах обробки залежить виключно від параметрів лазерного опромінювання.

Запропоновано математичну модель процесу, та наведені залежності, які пов'язують характеристики наплавленого шару з параметрами плазмового струменя та умовами введення в нього порошкового матеріалу, параметрами лазерного опромінювання підігрітого порошку і матеріалу основи. На базі отриманих даних розроблено розгорнутий алгоритм визначення технологічних параметрів як на підготовчому, так і завершальному етапах процесу лазерно-плазмового наплавлення, які забезпечують формування поверхневих шарів з заданими розмірами, характеристиками якості і продуктивністю.

Висвітлюються можливості використання запропонованого комбінованого процесу лазерно-плазмового наплавлення для відновлювання та зміцнення реальних деталей важкої промисловості, автомобільного та залізничного транспорту, механізмів, які використовуються при пошуку корисних копалин, добуванні нафти і газу, тощо.

УДК 621.315.592

**В.М. Жировецький¹, Б.П. Ковалюк², Б.К. Котлярчук¹, В.С. Мочарський²,
Ю.М. Нікіфоров², В.В. Онісімчук¹, Д.І. Попович^{1,3}, А.С. Середницький¹**

¹*Інститут прикладних проблем механіки та математики ім.Я.С. Підстригача,
Львів, Україна,*

²*Тернопільський національний технічний університет ім.І.Пулюя,
м.Тернопіль, Україна,*

³*Національний університет “Львівська політехніка”,
м. Львів, Україна*

ЛАЗЕРНА УДАРНО-ХВИЛЬОВА ОБРОБКА НАНОПОРОШКОВОГО ZnO

У даній роботі нами були проведені дослідження впливу лазерних ударних хвиль на структуру нанопорошкового ZnO. Експериментально було проведено та проаналізовано серію дії п'яти імпульсів лазера на пластину алюмінію з нанесеним на неї нанопорошком ZnO. Опромінення проводилося за допомогою лазерної установки на базі неодимового лазера ГОС-1001 ($q=10^8-10^9$ Вт/см², $\tau=50$ нс). Проведений мікроскопічний аналіз показав, що під дією високих енергій імпульсного лазерного випромінювання мають місце процеси масо-переносу та нерівноважного плавлення [1], що призводить до часткового взаємного сплавлення частинок нанопорошку ZnO із поверхневими нерівностями алюмінію. Аналіз особливостей структури поверхні показав, що у зонах підвищеної дії лазерних ударних хвиль, а також теплової дії лазерного випромінювання спостерігаються структури [2], що утворилися через проплавлення рельєфних нестійких утворень на поверхні алюмінію та частинок нанопорошку ZnO, що може характеризуватися взаємно легуючим впливом з подальшим утворенням дефектів у структурі обох матеріалів.

Хвилеподібна періодична поверхня, на нашу думку, є результатом утворення нестійкості внаслідок виникнення термокапілярних процесів, зв'язаних із залежністю коефіцієнта поверхневого натягу розігрітого матеріалу від температури та наступного неоднорідного плавлення. На процес впливають також імпульс віддачі, що виникає внаслідок поширення плазми, парів та відбитої від тильного боку зразка хвилі розвантаження з крутим фронтом, яка зустрічається біля поверхні з тепловою хвилею, що має швидкість поширення набагато нижчу.

1. M.A. Reshchikov, H. Morkoc, B. Nemeth, J. Nausec, J. Xie, B. Hertog, A. Osinsky, *Physica B* **401–402**, 358 (2007).
2. S.I. Dolgaev, S.V. Lavrishev, A.A. Lyalin, A.V. Simakin, V.V. Voronov, G.A. Shafeev, *Phys. Vibrations*, **3**, 231 (1999).

УДК 539.12.04, 621.378.325

**Юрій Нікіфоров¹, Богдан Ковалюк¹, Оксана Маньовська¹,
Віктор Янушкевич²**

¹*Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,
м. Тернопіль, Україна*

²*ЗАТ «Конверсія»,
м. Москва, Росія*

ЛАЗЕРНІ УДАРНІ ХВИЛІ МАЛОЇ АМПЛІТУДИ: ОСОБЛИВОСТІ ВПЛИВУ ТА ЗАСТОСУВАННЯ

По мірі розширення можливостей лазерної техніки та урізноманітнення досліджень впливу потужного лазерного випромінювання на матеріали зростає інтерес до вивчення впливу лазерних ударних хвиль (ЛУХ) як помітної складової комплексної лазерної дії із специфічними властивостями. Про це свідчить значне збільшення кількості публікацій по даній тематиці в США, Росії, Китаї і Європейських країнах.

В Україні перші дослідження по впливу лазерних ударних хвиль малої амплітуди почали проводитись в ТНТУ (тоді Тернопільський філіал ЛПІ) у співпраці із відділом електронної структури Інституту металофізики АН УРСР на початку 80-х років по тематиці Всесоюзної програми “Дослідження матеріалів для першої стінки термоядерного реактора”.

Якщо в перші роки з моменту створення потужних лазерів дія ЛУХ на матеріали вивчалась як руйнуючий фактор, то на даний момент, завдяки розвитку методик опромінювання, виявлення ряду закономірностей зміни характеристик матеріалів, лазерна ударно хвильова обробка стала одним із сучасних методів модифікації матеріалів на промисловому рівні і навіть поділяється на LPF (Laser Peen Forming) та LSP (Laser Shock Peening).

Для її поширення важливим є дослідження взаємодії потужного лазерного випромінювання із матеріалами, коли опромінювання здійснюється через прозоре конденсоване середовище лазером в режимі модульованої добротності. В таких умовах опромінення при відносно невеликих енергіях досягається необхідний для змін властивостей матеріалів тиск ударної хвилі. До ЛУХ неруйнуючого характеру, як правило, відносять ударні хвилі малої амплітуди, що генеруються лазерами з потужністю $2 \cdot 10^7 - 4 \cdot 10^9$ Вт/см².

В роботі розглянуто генерацію та властивості ЛУХ малої амплітуди. Аналізуються відмінності дії ЛУХ від інших видів лазерного впливу, глибина та характерний об’єм поля механічних зміщень та відповідних змін властивостей, що спостерігались експериментально.

Наведено результати експериментів по модифікації пластичних та мало пластичних матеріалів, в тому числі сплавів на основі заліза та кремнію, алюмінію, політетрафторетиленових плівок при різних густинах потоків енергії та пічковості лазерних імпульсів, опромінених в різних прозорих конденсованих середовищах. По просвітленню політетрафторетиленових плівок, що спостерігалась нами під дією ЛУХ, досліджено характер розсіяння

енергії ЛУХ по глибині. Дані результати підтверджуються картиною, що спостерігалась в опромінених зразках армко-заліза при дослідженнях, проведених спільно із професором Нищенко М.М. (Ін-т металофізики НАН України ім. Г.В. Курдюмова). Експерименти по опромінюванню сталей при генерації ЛУХ показали збільшення корозійної стійкості різних сталей для різних типів середовищ, а також зростання енергії руйнування зразків теплостійкої сталі. Останнє пояснюється перерозподілом напружень, викликаних дією ЛУХ, що залежить як від умов опромінення, так і від їх початкового розподілу.

Для дослідження впливу ЛУХ на поверхню матеріалів використовуються методи радіаційної фізики, починаючи від методу електроопору та вольт-амперних характеристик та закінчуючи ефектом Месбауера, електрон-позитрон анігіляції та електронної мікроскопії. Тому важливим фактором, що стимулює розширення досліджень впливу ЛУХ на матеріали, є спільна робота спеціалістів різних галузей та установ.

В спільних роботах, проведених із групою професора М.М. Берченко (Національний університет „Львівська політехніка”), було підтверджено перерозподіл напружень в складних напівпровідникових матеріалах (КРТ) під дією ЛУХ та створення напруженого стану, за якого затруднюється рух дислокацій, а також показано, що ЛУХ малої амплітуди ведуть до відпаду точкових дефектів в даних матеріалах, подібно до того, як це спостерігалось в елементарних напівпровідниках, та зменшують в них кількість різного типу макронеоднорідностей.

В останній час за результатами комп’ютерного моделювання нами встановлено особливості керування властивостями приповерхневих шарів матеріалів при наявності теплового та ударно хвильового факторів лазерної дії та показані способи керування величиною тиску ударної хвилі шляхом зміни параметрів оптичної системи лазерної установки, товщини та виду прозорого середовища. Виявлені особливості абляції, що виникає при опромінюванні в різних середовищах матеріалів, які застосовуються в світлотехніці, та запропоновано їх пояснення.

Застосування результатів комп’ютерного моделювання дало можливість розвинути експрес-метод дослідження енергетичних процесів, що пов’язані із виділенням теплоти на тильній стороні зразку при дії ЛУХ на його фронтальну поверхню.

Як показали недавно проведені експерименти, ЛУХ можуть також служити важливим фактором при імплантації нанотрубок в поглинаючі твердотільні підкладки. При цьому важливу роль відіграють теплофізичні та оптичні властивості підкладки.

Юрій Дрогобицький

*Тернопільський національний педагогічний університет імені Володимира Гнатюка,
м. Тернопіль, Україна*

РОЗІГРІВ МАСИВНИХ ЗРАЗКІВ СЕРІЄЮ ІМПУЛЬСІВ

Розглянуто задачу про розігрів масивних однорідних зразків серією лазерних імпульсів. Визначено температурні розподіли, що виникають внаслідок поглинання енергії на поверхні зразка.

Нехай на ліву поверхню зразка падає лазерне випромінювання, що складається з серії імпульсів прямокутної форми. Випромінювання характеризується інтенсивністю, та двома часовими параметрами: τ_1 – тривалість одного імпульсу, та τ_2 – час між двома послідовними імпульсами. Для встановлення характерних особливостей задачі розглядаємо одновимірний випадок, тобто бічні грані вважаємо теплоізолюваними. Зразок вважаємо нескінченно довгим (умови коли можна розглядати зразок як нескінченний розглянуті у [1]).

Для знаходження температурного поля розв’язуємо рівняння теплопровідності:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1)$$

Із початковими та граничними умовами:

$$\begin{cases} -\kappa \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = Q(t), \\ T|_{t=0} = T_0 \end{cases} \quad (2)$$

Перша умова описує потік тепла через ліву поверхню зразка (функція $Q(t)$ описує серію прямокутних імпульсів), друга визначає початкову температуру.

Отримано аналітичний розв’язок задачі (1)-(2). Показано, що температурний відгук суттєво залежить від співвідношення між часовими параметрами τ_1 і τ_2 . Так, у граничних випадках отримаємо або майже монотонний розігрів зразка, коли $\tau_1 \gg \tau_2$, або зразок не буде «відчувати» серію імпульсів ($\tau_1 \ll \tau_2$). У випадку скінченних зразків суттєвий вплив на характер температурних відгуків також буде мати співвідношення між характерними часами серії імпульсів і часом релаксації [1].

1. А. Ф. Карбалло Санчес, Ю.Г. Гуревич, Г.Н. Логвинов, Ю.В. Дрогобицький, О.Ю. Титов, ФТТ **41**, 4 (1999).

УДК 539.12.04, 628.979

Оксана Маньовська, Юрій Нікіфоров, Володимир Гладьо
*Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,
м. Тернопіль*

ЕЛЕКТРОННА МІКРОСКОПІЯ РЕЛЬЄФУ ПОВЕРХНІ МІДІ ТА СТАЛІ, ОПРОМІНЕНИХ В РІЗНИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Опромінення матеріалів лазером в режимі генерації ударних хвиль у різних середовищах, перш за все, приводить до зміни рельєфу та структури поверхні опроміненого матеріалу. За допомогою електронного мікроскопа РЕМ 106-М були отримані картини поверхонь сталі та міді при різних умовах опромінення. Із експериментальних результатів опромінення матеріалів лазером в режимі модульованої добротності випливає, що матеріали із різними теплофізичними властивостями при опроміненні в різних середовищах дають суттєві відмінності в рельєфі поверхні. Важливий вплив на рельєф поверхні сталі при опроміненні в прозорому конденсованому середовищі (ПКС) чинить пічковість лазерного імпульсу.

Встановлено, що розподіл застиглої речовини на краю та в центрі матеріалів після опромінення кардинально відмінний. В залежності від відстані до центру плями опромінення та густини потоку випромінювання, візуальна картина може бути піноподібною, хвилеподібною або мати вигляд візерунку. Періодичність повторень хвиль, утворених після застигання матеріалу внаслідок дії тиску плазми та імпульсу віддачі при однакових умовах опромінення, відрізняється для сталі та міді. Так, при опроміненні на повітрі однопічковим лазерним імпульсом хвилеподібний рельєф повторюється з кроком 35-15 мкм в міді та 75-65 мкм в сталі. При опроміненні в ПКС крок становить 25-20 мкм в міді та лежить в межах 92-58 мкм для сталі. Крок зменшується в міру віддалення від центру плями опромінення.

Для пояснення різного характеру розтікання необхідно врахувати, як масову швидкість частинок в сталі та міді при дії тиску, що визначається формулою $U = \frac{p}{\rho c}$ (p – тиск, ρ – густина, c – швидкість звуку в матеріалі), так і відмінності у в'язкості даних матеріалів при різних температурах.

Відмінностей між характером розтікання, який оцінювався довжиною застигаючих хвиль матеріалу (періодичністю повторень), при опроміненні однопічковим імпульсом в ПКС та на повітрі для міді практично немає, а для сталі різниця становить 1,7-2 рази. Для міді (при двопічковому імпульсі) відбувається збільшення довжини застигаючих хвиль матеріалу із збільшенням енергії. Це означає, що другий пічок впливає на картину розтікання, накладаючись на процес, викликаний дією першого пічка. Рельєф поверхні нагадує результат накладання сферичних хвиль, викликаних осіданням крапель (зародків міді) в розплав та його застигання.

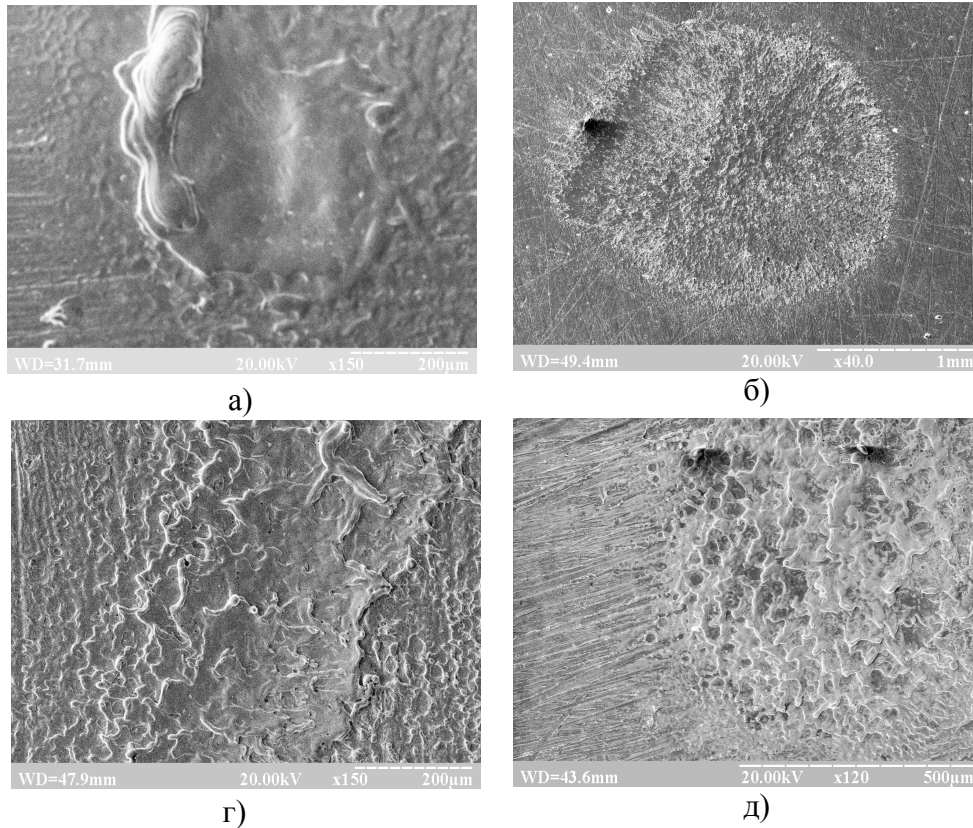


Рисунок 1 - Поверхня опромінених матеріалів:

- а) Опромінена на повітрі сталь 15X13МФ, енергія лазерного імпульсу 8 Дж/см²;
- б) Опромінена в ПКС (епоксидна смола) сталь 15X13МФ енергія лазерного імпульсу 20 Дж/ см²;
- в) Опромінена на повітрі мідь, енергія лазерного імпульсу 7,25 Дж/см²;
- г) Опромінена в ПКС (епоксидна смола) енергія лазерного імпульсу 20 Дж/ см².

Картина, отримана з результатів електронно-мікроскопічних досліджень зміни поверхні матеріалу при опроміненні в ПКС та на повітрі, дозволила пояснити результатів, отриманих при дослідженні абляції методом винесення маси речовини. Під час абляції вириваються частинки великих і малих розмірів із центра плями, де температура є максимальною.

При наявності ПКС, на відмінну від відомих результатів опромінення у вакуумі та на повітрі, відліт частинок стримується плазмою і збільшується відсоток їх повертання на поверхню, що підтверджуються даними по зважуванню зразків до і після опромінювання та експериментами по визначенню імпульсу віддачі.

УДК 539.12.04

Юрій Нікіфоров, Богдан Ковалюк, Віталій Мочарський
*Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,
м. Тернопіль, Україна*

ПРОСВІТЛЕННЯ ПОЛІТЕТРАФТОРЕТИЛЕНОВОЇ ПЛІВКИ ПІСЛЯ ЛАЗЕРНОГО БОМБАРДУВАННЯ НАНОТРУБКАМИ

Лазерна ударно-хвильова обробка є сучасною технологією зміни структури та властивостей матеріалів. Вона знайшла своє застосування в мікро- та наноелектроніці, фізиці та хімії поверхні, медицині тощо.

Під час такої обробки в зоні дії лазера утворюються надвисокі температура та тиск, що є основними чинниками, які впливають на модифікацію матеріалів. Раніше нами було показано, що при дії лазерної ударної хвилі політетрафторетиленова плівка просвітлюється, що дає можливість використовувати її для візуалізації глибини проникнення та затухання ударної хвилі.

Дана робота присвячена просвітленню політетрафторетиленової плівки після лазерного бомбардування нанотрубками.

Експерименти по опроміненню та бомбардуванню здійснювали на лазерній установці ГОС-1001, яка працювала в режимі модульованої добротності. Густина потоку енергії лазерного імпульсу, який використовувався під час експериментів, становила $2 \cdot 10^9$ Вт/см². Опромінення проводилося з використанням прозорого конденсованого середовища (ПКС). В якості ПКС застосовували плексиглас.

Як показали експерименти, після бомбардування політетрафторетиленової плівки частина нанотрубок надійно закріпилася на її поверхні. Проведена оптична мікроскопія засвідчила просвітлення окремих ділянок плівки після взаємодії з конгломератами нанотрубок. Характер просвітлення аналогічний тому, що спостерігався при лазерній ударно-хвильовій обробці політетрафторетиленових плівок через захисний мідний екран.

Вимірювання коефіцієнту пропускання плівок до і після опромінення за допомогою концентраційного фотокolorиметра КФК-3 засвідчило зміну коефіцієнта пропускання після бомбардування нанотрубками. Так в діапазоні довжин хвиль від 500 нм до 750 нм спостерігається збільшення коефіцієнта пропускання обробленої політетрафторетиленової плівки в порівнянні з вихідною на 2-10% (максимум на 600 нм).

Це свідчить про те, що швидкість польоту нанотрубок після лазерної дії є високою, і тиск, який створюється ними на поверхню, становить величину порядку 1-2 ГПа.

Також було відмічено зміну опору плівки після її бомбардування нанотрубками.

Отримані результати показали перспективність такого бомбардування нанотрубками плівок з метою модифікації їх структури і властивостей.

УДК 539.3

Д.Б. Куриляк, М.В. Войтко

Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка НАН України,
 м. Львів, Україна

РЕЗОНАНСНЕ РОЗСПІВАННЯ ПРУЖНОЇ SH-ХВИЛІ ДЕФЕКТОМ НА ПОВЕРХНІ З'ЄДНАННЯ ПЛАСТИНИ І ПІВПРОСТОРУ

Однією з проблем сучасних технологій візуалізації в неруйнівному контролі є виявлення пошкоджень, які передують утворенню тріщин на межі з'єднання матеріалів [1–3]. Один із можливих шляхів її розв'язання є вивчення

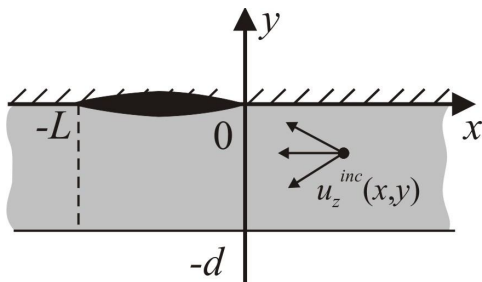


Рисунок 1 - Схема збудження дефекту SH-модю

особливостей резонансного розсіяння хвиль такими дефектами і визначення оптимальних частот зондування. У цій праці розглянуто задачу взаємодії SH-моди з дефектом з'єднання, який моделюємо імпедансною поверхнею.

У декартовій системі координат $Oxyz$ розглянемо пластину $P: \{x \in (-\infty, \infty), y \in (-d, 0), z \in (-\infty, \infty)\}$, з'єднану з півпростором $S: \{x \in (-\infty, \infty), y > 0, z \in (-\infty, \infty)\}$. Нехай на межі з'єднання імпедансна поверхня займає область $\Gamma: \{x \in (-L, 0), y = 0, z \in (-\infty, \infty)\}$ (рис. 1) і опромінюється однією з незатухаючих SH-мод, що поширюються у пластині P :

$$u_z^{inc} = u^{inc}(x, y) = e^{\gamma_j x} \sin \beta_j y. \quad (1)$$

Тут $k = k' + ik''$ – хвильове число, $k' \gg k'' > 0$; $\gamma_j = \sqrt{\beta_j^2 - k^2}$, $\beta_j = \pi(2j - 1)/2d$, $j = 1, 2, 3, \dots$

Відповідну крайову дифракційну задачу формулюємо так:

$$\Delta u + k^2 u = 0, \quad (2)$$

$$\partial u^t(x, 0) / \partial y + \varepsilon u^t(x, 0) = 0, \quad x \in (-L, 0), \quad (3)$$

$$u^t(x, 0) = 0, \quad x \in (-\infty, -L) \cup (0, \infty), \quad (4)$$

$$\partial u^t(x, -d) / \partial y = 0, \quad (5)$$

де ε – імпедансний параметр.

$$u^t(x, y) = u(x, y) + u^{inc}(x, y). \quad (6)$$

Використовуючи перетворення Фур'є, крайову задачу (2)–(5) зводимо до функціонального рівняння типу Вінера–Хопфа, яке запишемо так:

$$M(\alpha) \left[\Psi^{(+)}(\alpha) + e^{-i\alpha L} \Psi^{-}(\alpha) \right] + \Phi(\alpha) = 0. \quad (7)$$

Тут $M(\alpha) = M_+(\alpha)M_-(\alpha) = \text{ch}(d\gamma) / (\gamma \text{sh}(d\gamma) - \varepsilon \text{ch}(d\gamma))$; $\gamma = (\alpha^2 - k^2)^{1/2}$, $\text{Re} \gamma > 0$; $\Psi^{-}(\alpha)$, $\Psi^{(+)}(\alpha)$ – невідомі Фур'є трансформанти поля напружень на межі

з'єднання зліва та справа від тріщини, $\Phi(\alpha)$ – невідома ціла функція, яка є Фур'є трансформантою зміщення на поверхні дефекту.

Рівняння (7) виконується у смузі $\Pi: \{-\tau_0 < \tau < \tau_0\}$, $\tau_0 \leq \min(\text{Im} k, \text{Re} \gamma_1)$, а функції $M_+(\alpha)$, $\Psi^{(+)}(\alpha)$ та $M_-(\alpha)$, $\Psi^-(\alpha)$ є регулярними відповідно у півплощинах $\text{Im} \alpha > -\tau_0$ і $\text{Im} \alpha < \tau_0$ ($\Psi^{(+)}(\alpha)$ допускає особливість у точці $\alpha = -i\gamma_j$). В областях регулярності, коли $|\alpha| \rightarrow \infty$, поведінка цих функцій є такою: $M_{\pm}(\alpha) = O(\alpha^{-1/2})$, $\Psi^{(\pm)}(\alpha) = O(\alpha^{-1/2})$.

Для малих значень імпедансного параметра ($|\varepsilon| \ll 1$) справедливе подання

$$M_{\pm}(\alpha) \approx \frac{\sqrt{\cos kd} \prod_{n=1}^{\infty} (1 \pm \alpha / i\gamma_{nc}) e^{\pm i\alpha d / \pi n}}{i\sqrt{(kd \sin kd + \varepsilon \cos kd)} (1 \pm \alpha / i\gamma_{0s}) \prod_{n=1}^{\infty} (1 \pm \alpha / i\gamma_{ns}) e^{\pm i\alpha d / \pi n}}, \quad (8)$$

де $\gamma_{nc} = \sqrt{\pi^2(n-1/2)^2/d^2 - k^2}$, $\gamma_{ns} = \sqrt{(\pi n - \varepsilon/\pi n)^2/d^2 - k^2}$, $\gamma_{0s} = \sqrt{\varepsilon/d^2 + k^2}$.

Розв'язок крайової задачі (2)–(5) шукаємо у класі функцій, що забезпечують виконання умови граничного поглинання на нескінченності та обмеженості енергії поля деформацій у довільному скінченному об'ємі.

Використовуючи методи факторизації та декомпозиції, рівняння (7) зводимо до нескінченної системи лінійних алгебричних рівнянь. Цю систему можна записати у матричному вигляді

$$[I + A]X = F. \quad (9)$$

Тут $A: \{a_{pm}\}_{p,m=0}^{\infty}$, $a_{pm} = -\frac{\delta_m \varepsilon_m d^{-2} e^{-\gamma_{ms} L}}{M_+^2(i\gamma_{ms}) \gamma_{ms}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\delta_n \varepsilon_n e^{-\gamma_{ns} L}}{\gamma_{ns} M_+^2(i\gamma_{ns}) (\gamma_{ns} + \gamma_{ps}) (\gamma_{ns} + \gamma_{ms})}$;

$\varepsilon_n = \begin{cases} 1/2, n=0 \\ 1, n>0 \end{cases}$, $\delta_n = \begin{cases} 1 - \varepsilon/3, n=0 \\ -1 + \varepsilon/p^2 n^2, n>0 \end{cases}$; $X = \{x_p\}_{p=0}^{\infty}$ – вектор невідомих,

$x_p = \Psi^{(+)}(i\gamma_{ps}) M_+(\gamma_{ps})$, $x_p = O(p^{-1})$, коли $p \rightarrow \infty$; I – одинична матриця,

$F = \{f_p\}_{p=0}^{\infty}$, $f_p = \frac{\beta_j M_+(i\gamma_j)}{\sqrt{2\pi} \gamma_{ps} - \gamma_j}$.

Оцінка модуля матричних елементів системи рівнянь (9) при $p, m \rightarrow \infty$ має вигляд

$$|a_{pm}| \leq C \frac{e^{-\pi L/d}}{pm}, \quad (10)$$

де $C = \text{const}$, що не залежить від m, p .

Оскільки $\|A\|_2 = \sum_{p,n} |a_{pn}|^2 < \infty$, то НСЛАР (9) має єдиний розв'язок, за

виключенням дискретних значень хвильового параметра, для яких однорідне

рівняння має ненульові розв’язки.

Характеристичне рівняння для визначення спектра вихідної дифракційної задачі матиме вигляд:

$$\det[I + A(\Omega)] = 0. \quad (11)$$

Рівняння (11), як функція комплексного параметра $\Omega = kd$, має особливості типу точок галуження, коли $\Omega = \pm(\pi n + \varepsilon/(\pi n))$ і $\Omega = \pm\pi(2n - 1)$ $n = 1, 2, \dots$ [4]. Необхідні корені дисперсійного рівняння (11) знаходимо на рімановій поверхні з $\text{Re}\Omega > 0$, $\text{Im}\Omega \leq 0$.

Із графіків на рис. 2 спостерігаємо явище галуження коренів, де кількість віток зростає зі збільшенням параметра $p = L/d$. При $d = \text{const}$ у випадку $\varepsilon = 0$ (рис.2а) мінімальна довжина тріщини, при якій спостерігається резонансне збудження становить $L \approx 0,1d$ [5]. Коли $\varepsilon > 0$, мінімальна довжина “неідеального” дефекту, за якого спостерігаємо резонансне збудження, є суттєво більшою ($L \approx 2d$, рис. 2б).

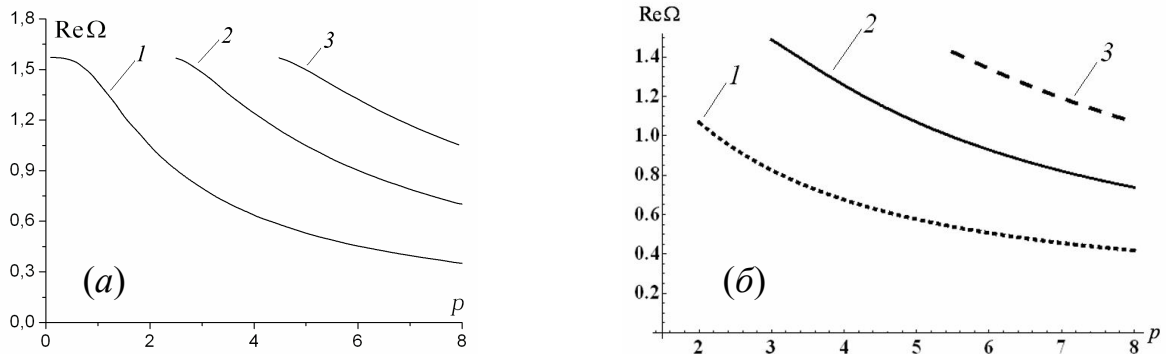


Рисунок 2 - Залежність дійсної частин комплексних коренів рівняння (11) від $p = L/d$ для випадку $\varepsilon = 0$ – а та $\varepsilon = 0,05$ – б; 1, 2, 3 – номери віток коренів.

1. К.-М. Lee, Journal of Computational Physics **227**, 431 (2007).
2. J. Cheng, J.J. Liu, and G. Nakamura, J. Math. Kyoto U. **43**, 165 (2003).
3. G. Cinar, Electromagnetics **29**, 165 (2009).
4. Назарчук З.Т., Куриляк Д.Б., Войтко М.В., Кулинич Я.П., Фіз.-хім. механіка матеріалів **47**, 115 (2011).
5. Назарчук З.Т., Куриляк Д.Б., Войтко М.В., Кулинич Я.П. Акустичний вісник **14**, 53 (2011).

УДК 539.42

О.В. Балабан, Б.Я. Венгрин

*Національний університет “Львівська політехніка”,
м. Львів, Україна*

ПРОЯВИ ВПЛИВУ УЛЬТРАЗВУКУ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ВУГЛЕЦЕВИХ МАТЕРІАЛІВ

Проблема пошуку нових матеріалів із наперед заданими функціональними характеристиками протягом останніх років все більше й щораз частіше починає проявлятися на тлі глобальних проблем людства. Адже з однієї сторони новітні пристрої потребують покращення якісних характеристик використовуваних для їх виготовлення матеріалів, а з іншого боку – вимагають безпечну для здоров'я, екологічну їх основу.

Надзвичайно актуальним на сьогодні є пошук нових вихідних форм вуглецевих матеріалів та підходів до покращення їх як питомих характеристик, так і робочих параметрів пристроїв на їх основі. Одними з таких пристроїв, в яких використовують вуглецеві матеріали з розвиненою пористою структурою, є молекулярні накопичувачі енергії чи суперконденсатори. В цих пристроях активовані вуглецеві матеріали успішно використовуються в якості накопичувального матеріалу електродів.

Авторами розглядається задача про вплив ультразвуку на вуглецеві матеріали природного походження. В даній роботі для досліджень нами було обрано активоване вугілля, отримане активаційною карбонізацією деревини, а саме березове активоване вугілля. З досліджуваного матеріалу було виділено фракції наступних розмірів: 0-40, 40-63, 63-80, 80-90, 90-200, а також більше 200 мкм. Поділ на фракції здійснювався за допомогою системи сит.

Було проведено дослідження по визначенні фізико-хімічних характеристик вище зазначених матеріалів. Для цього нами було виготовлено електрохімічні комірки з використанням досліджуваних матеріалів.

Гальваностатичні цикли заряд/розряд проводили струмом $I=1$ мА в області напруг $U=0 - 1$ В за допомогою гальваностатуючого пристрою. Ємність матеріалів визначалась для електродної суміші складу вуглецевий матеріал: зв'язуюче = 95:5 мас. %. В якості електролітної системи вибирався 30% водний розчин гідроксиду калію.

Останніми роками для ціленаправленої модифікації найрізноманітніших матеріалів використовують дію ультразвуку на них. Нами було проведено серію досліджень по вивченні впливу ультразвукової хвилі на отримані вище матеріали. Ультразвукове опромінення було здійснено за допомогою ультразвукової установки з п'єзокерамічним диспергатором. В якості диспергуючого середовища використовувалась дистильована вода. Частота ультразвукового опромінення становила 22 кГц, тривалість опромінення - 20 хв.

Як приклад, на рисунку 1 представлено зарядно/розрядні криві для вихідної фракції 90-200 мкм (крива 1) та для підданої ультразвуковому опроміненню (крива 2).

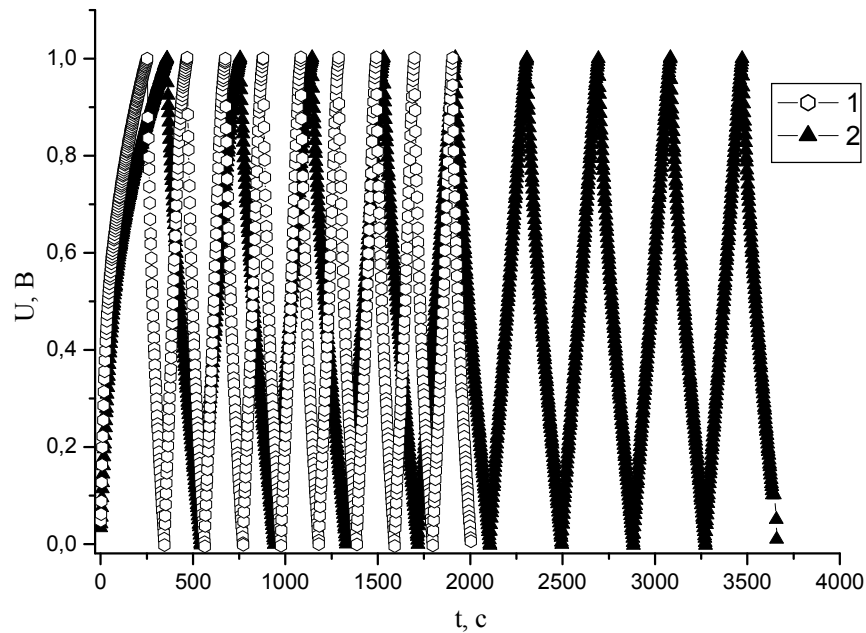


Рисунок 1 - Гальваностатичні зарядно/розрядні криві для вихідної фракції 90-200 мкм (1) та підданої ультразвуковому опроміненню (2).

З рисунку 1 бачимо, що тривалість однакової кількості зарядно/розрядних циклів для вихідної вуглецевої фракції 90-200 мкм та підданої впливу ультразвуку різняться між собою майже в 2 рази. Причому для вугілля, обробленого ультразвуком, отримуємо вище значення питомої електричної ємності. Слід зазначити, що активні маси електродів в обох випадках, представлених на рисунку 1, є практично однаковими. Це свідчить про двократне зростання питомої електричної ємності. Обчислені значення для питомих електричних ємностей досліджуваних матеріалів, представлені у таблиці 1.

Таблиця 1 - Значення питомих електричних ємностей досліджуваних матеріалів.

Вугільні фракції, мкм	Питома ємність вихідного вугілля, Ф/г	Питома ємність опроміненого вугілля, Ф/г
<40	90,20	58,66
40-63	117,00	39,41
63-80	74,91	38,42
80-90	62,20	62,84
90-200	46,54	73,06
>200	65,94	88,75

Для пояснення експериментальних даних нами були проведені теоретичні розрахунки про вплив ультразвуку на пористі матеріали на прикладі моделі жорсткої сфери, які вказують на можливість розпаду порошинок вугілля. Тобто, ультразвук приводить до подрібнення порошинок. Своєю чергою таке явище веде до збільшення питомої площі поверхні матеріалу, а це покращує питомі характеристики вугілля. Проте, хоча експериментальні дані показали, що ультразвук впливає на фізико-хімічні характеристики досліджуваних матеріалів, але, імовірно, є відмінності у типі цього впливу, адже кожна фракція вугілля відчуває дію опромінення по-різному. Це і відображається у значенні величини питомої ємності, бо для деяких фракцій після обробки ультразвуком отримали неочікувані результати. Тому можна припустити, що дрібні пористі частинки, перемішуючись під дією ультразвуку, мають тенденцію до утворення кластерів, розміром ~ 200 мкм. Відповідно активна площа зменшується, ємність - спадає.

УДК 539.104, 537.311.33, 621.315.5

Петро Трохимчук

*Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки,
 м. Луцьк, Україна*

РЕЛАКСАЦІЙНА ОПТИКА ТА СИНЕРГЕТИКА

Релаксаційна оптика (РО) вивчає процеси незворотної взаємодії оптичного випромінювання з твердими тілами [1]. Цей розділ фізики є синтезом квантової електроніки, радіаційної фізики твердого тіла, фізичної хімії, фізики плазми та нерівноважної термодинаміки [1 – 3].

Необхідність виникнення такого розділу фізики обумовлена в першу чергу пошуком нових ефективних технологічних методів мінітюаризації та підвищення надійності елементів оптоелектронних систем (включаючи наноструктури), а також розширенням застосування лазерного випромінювання для інших технологій [1, 2].

В основу релаксаційної оптики покладена кінетична класифікація явищ взаємодії оптичного випромінювання з твердими тілами (Таблиця 1) [1, 2].

Таблиця 1 - Основні ефекти релаксаційної оптики

Кінетичні ефекти	Динамічні ефекти	Змішані ефекти
1. $\tau_0 > \tau_h$; $\tau, \tau' \gg \tau_h, \tau_r$ для будь-яких N_f та N_s маємо фотохімічні процеси (за винятком $N_f \geq N_s$)	4. $\tau_0 < \tau_h$; $\tau < \tau_i, \tau_r$ нерівноважні ефекти; нелінійна оптика; інтерференційні явища;	7. Лазерне відпалювання напівпровідників:
2. $\tau_0 < \tau_h$; $\tau_h < \tau' < \tau_r$; $\tau < \tau_r$; $h\nu > E_g$ – фотостимульоване підпорогове дефектоутворення	5. $\tau_0 > \tau_h$, τ_r ; $N_f \leq N_s$ – Динамічне підпорогове дефектоутворення, ефект Яна-Теллера, теплові складові лазерного відпалювання та лазерного легування	а) при $\tau_0 < \tau_h$; $\tau > \tau_r$, $E_g > h\nu > E_a$ – явища 1 та 3; а при $\tau_0 > \tau_h$, $N_f \gg N_s$ явища 5 та 6;
3. $\tau > \tau_h$, τ_r ; $N_f \ll N_s$ класична рівноважна фотохімія	6. $\tau_0 > \tau_h$, τ_r ; $N_f \gg N_s$ – плавлення, теплове руйнування тощо.	б) $h\nu > E_g$, $N_f \gg N_s$ явища 5 та 6 8. Лазерне легування та ефекти переключання плівок – суміш явищ 1-6

Тут, згідно з М.М. Боголюбовим, уведені часи, які відповідають різним фізичним явищам і, відповідно, поданням, з допомогою яких їх описують: τ_h – час хаотизації, відповідає локальній релаксації акту збудження (взаємодії); τ_r – динамічний час релаксації системи; τ_i – час опромінення кристала; τ і τ' – час життя збудження в рівноважному та нерівноважному станах, відповідно; τ_0 – час утворення незворотної зміни. Ця класифікація доповнена енергетичними та концентраційними співвідношеннями. Енергетичними характеристиками є: $h\nu$ – енергія кванта падаючого випромінювання; E_g – ширина забороненої зони напівпровідника; E_a – енергія активації відповідного центра збудження; kT –

теплова енергія. Концентраційні характеристики N_f – густина світлового потоку, квант.см^{-2} ; N_s – густина центрів поглинання (розсіяння) випромінювання.

Часові, енергетичні та концентраційні співвідношення, що наведені в таблиці 1, відповідають тим чи іншим класам фізичних процесів взаємодії оптичного випромінювання з речовиною. В даному випадку ми не прив'язані до того чи іншого математичного формалізму і тому, в залежності від того, які ефекти ми будемо вимірювати, випромінювальної чи безвипромінювальної релаксації, відповідно класичні оптичні (включаючи нелінійнооптичні) чи релаксаційнооптичні, ми й повинні підбирати відповідний метод моделювання.

В якості обґрунтування такого підходу використана узагальнена теорема Сато (узагальнена теорема редукції) [1]. Згідно цієї теореми всяку систему нелінійних інтегро-диференціальних рівнянь можна звести до системи звичайних алгебраїчних рівнянь групи монохромії яких (розв'язки) співпадають. Це було поширено на класифікації.

Такий підхід дозволяє вибирати методи моделювання для опису як незворотних процесів взаємодії оптичного випромінювання з твердими тілами так і процеси випромінювальної релаксації (процеси перевипромінювання та перепоглинання, нелінійно та акустооптичні процеси тощо) [1].

З поняття часової ієрархії фізичних процесів виникла синергетика (теорія самоузгодженої дії), першою найбільш областю застосування якої була фізика лазерів [4]. Саме проблема впорядкування відповідних часів взаємодії та релаксації є основною в релаксаційній оптиці. Безпосередньо синергетичний метод (метод адіабатичного виключення змінних) був використаний при моделюванні ефектів РО за допомогою систем кінетичних рівнянь В. Вольтерри [1].

Однак для більш детального опису процесів РО доцільно використовувати більш повну класифікацію, що наведена в таблиці 1. Зокрема фізико-хімічна модель послідовного каскадного збудження відповідного типу хімічних зв'язків в опромінених матеріалах дозволяє з єдиної точки зору пояснити такі явища сучасної фізики як генерацію випромінювання в напівпровідникових лазерах, механізми руйнування напівпровідникових лазерів, хаотизацію лазерного випромінювання (проблема Хакена), доповнення до критерію утворення дефектів за Зейтцем, фазові та політропні трансформації в лазерноопромінених напівпровідниках (антимонід та арсенід індію, телурид кадмію, селенід кадмію, селенід цинку, сульфід кадмію, кремній, германій, КРТ та т.п.), а також отримання лазерно-індукованих алотропних фаз вуглецю, включаючи переходи алмаз–графіт, графіт–алмаз, графіт–графіти та т.п.

Для задовільного пояснення експериментальних результатів по незворотній взаємодії оптичного випромінювання з антимонідом індію була використана двовимірні решітка сфалериту [1]; а з кремнієм фазова діаграма, згідно якої кремній може мати як мінімум чотири кристалографічні модифікації [1–3]. Такий підхід дозволив з єдиної точки зору пояснити такі явища, як процес лазерної генерації напівпровідникових лазерів, процес зриву цієї ж генерації та процес хаотизації лазерного випромінювання (проблема Хакена).

Слід зазначити, що методами синергетики цю задачу намагався розв’язати Хакен [4] і певні аспекти цих явищ ним були пояснені, однак він не зміг пояснити механізмів цих явищ.

З теоретичної точки зору цей підхід також є суттєвим доповненням до динамічних теорій фазових переходів та перетворень, що супроводжують нелінійно оптичні ефекти [4–7].

Дуже важливим є більш детальне дослідження співвідношення між випромінювальною та безвипромінювальною релаксацією та вплив ефектів перевипромінювання та явищ нелінійної оптики на формування незворотних змін в опромінених матеріалах [1,3]. На відміну від класичної нелінійної оптики нелінійнооптичні ефекти (дроблення кванта опромінення, генерація гармонік, up-коверсія та інші) можуть досліджуватись по їх незворотному «сліду» в середовищі і, таким чином, РО дозволяє поширити область вивчення нелінійнооптичних явищ на область власного поглинання світла.

Проаналізована аналогія мікроскопічного механізму Черенковського випромінювання [1] з поляритонно-плазмонною моделлю лазерного руйнування твердих тіл, та показані певні аналогії цих явищ. Згідно поляритонно-плазмонної моделі Макіних [1,8] для опису цих явищ може бути використана модель нелінійної динаміки Файгенбаума. Сам же процес лазерного руйнування (форма каскаду незворотних змін в об’ємі опромінюваного матеріалу) має кут рівний куту Черенковського опромінення. І, таким чином, можна стверджувати, що мікроскопічний механізм Черенковського випромінювання є «затравочним» процесом для об’ємного лазерного руйнування діелектриків.

Отже, можна зробити висновок, що з методичної точки зору РО можна розглядати як енергетично-концентраційне розширення синергетики на область незворотної взаємодії лазерного випромінювання з твердими тілами. Такий підхід дозволяє, поряд з макроскопічним динамічним описом, пояснити мікроскопічні механізми відповідних явищ, тобто більш повно та адекватно пояснити динаміку цих процесів.

1. Р.Р. Trokhimchuk, *Foundations of Relaxed Optics* (Vezha, Lutsk, 2011), 627 p.
2. П.П. Трохимчук, *Радіаційна фізика твердого тіла* (Вежа, Луцьк, 2007), 394с.
3. Р.Р. Trokhimchuk, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials* **14**, 363 (2012).
4. Г. Хакен, *Синергетика* (Мир, Москва, 1980), 405 с.
5. Г. Хакен, *Лазерная светодинамика* (Мир, Москва, 1988), 350 с.
6. Я. Пери́на, *Квантовая статистика линейных и нелинейных оптических явлений* (Мир, Москва, 1987), 368 с.
7. А.В. Андреев, В.И. Емельянов, Ю.А. Ильинский, *Кооперативные явления в оптике* (Наука, Москва, 1988), 287 с.
8. В.С. Макин, Р.С. Макин, А.Я. Воробьев, Ч. Гуо, *Письма в журнал технической физики* **34**, 55 (2008).

УДК 537.9, 537.622

Олег Держко

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України
м. Львів, Україна*

ПЛОСКОЗОННИЙ ФЕРОМАГНЕТИЗМ МІЛЬКЕ-ТАСАКІ

Розгляньмо стандартну модель Габбарда, в якій найнижча одноелектронна зона є цілком бездисперсійною (енергія електрона не залежить від хвильового вектора). Таку зону ще називають плоскою. Одноелектронні стани з цієї зони візуалізуються як локалізовані у малому фрагменті термодинамічно великої ґратки (у пастці). За відсутності одновузлового відштовхування Габбарда ($U=0$) будь-який багатоелектронний стан, збудований з одноелектронних станів з бездисперсійної одноелектронної зони, є основним. При «ввімкненні» $U>0$ виродження основного стану знімається лише частково: через принцип Паулі електрони залишаються в основному стані, навіть перебуваючи у пастках, що мають спільні вузли, якщо ці електрони є у симетричному спіновому стані (іншими словами, утворюють феромагнітний кластер). Якщо ж при цьому концентрація електронів на ґратці є достатньою для виникнення «гігантського» (феромагнітного) кластера, що містить ненульову фракцію всіх електронів, то стається перехід в феромагнітний (основний) стан.

Цей механізм виникнення феромагнетизму запропонували Андреас Мільке і Галь Тасакі приблизно двадцять років тому [1]. Однак, незважаючи на ряд спроб [2], досі немає експериментальної реалізації такої схеми появи феромагнетизму.

1. A. Mielke, J. Phys. A **24**, L73 (1991); **24**, 3311 (1991); **25**, 4335 (1992); Phys. Lett. A **174**, 443 (1993); H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **69**, 1608 (1992); A. Mielke and H. Tasaki, Commun. Math. Phys. **158**, 341 (1993).
2. R. Arita, K. Kuroki, H. Aoki, A. Yajima, and M. Tsukada, Phys. Rev. B **57**, R6854 (1998); T. Kimura, H. Tamura, K. Shiraishi, and H. Takayanagi, Phys. Rev. B **65**, 081307(R) (2002); H. Tamura, K. Shiraishi, T. Kimura, and H. Takayanagi, Phys. Rev. B **65**, 085324 (2002); R. Arita, Y. Suwa, K. Kuroki, and H. Aoki, Phys. Rev. Lett. **88**, 127202 (2002); Z. Gulácsi, A. Kampf, and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **105**, 266403 (2010).

УДК 538.9

Юрій Дубленич

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
м. Львів, Україна*

КОНТИНУУМ АПЕРІОДИЧНИХ СТРУКТУР У ГРАТКОВОМУ ГАЗІ НА ТРИКУТНІЙ ГРАТЦІ

Проблема формування структур є однією з найцікавіших проблем сучасної фізики. Однак, попри десятиліття інтенсивних досліджень, у цій галузі залишається чимало фундаментальних питань, на які й досі нема відповіді. Серед них ось які. Чому утворюються квазикристалічні структури (ці структури мають далекий порядок, як звичайні кристали, однак не мають трансляційної симетрії) і як вони ростуть? Яким є механізм нескінченної адаптативності у деяких сполуках, де «у певних межах, кожен склад може дати цілком упорядковану кристалічну структуру»? Чи існують упорядковані структури, які не є ні звичайними кристалічними, ні квазикристалічними? Наші дослідження проливають трохи світла на усі ці проблеми.

Ми розглядаємо доволі просту модель ґраткового газу з одним сортом частинок на трикутній ґратці зі взаємодіями скінченного радіуса і показуємо, що в цій моделі існує континуум основних станів, параметризованих концентрацією частинок, або й хемічним потенціалом (якщо взаємодія сягає восьми сусідів). Континуум містить як періодичні (з точністю до фазонних перескоків частинок уздовж певних каналів), так і аперіодичні структури. Цілком можливо, що серед останніх є як квазикристалічні структури, так і аперіодичні неквазикристалічні.

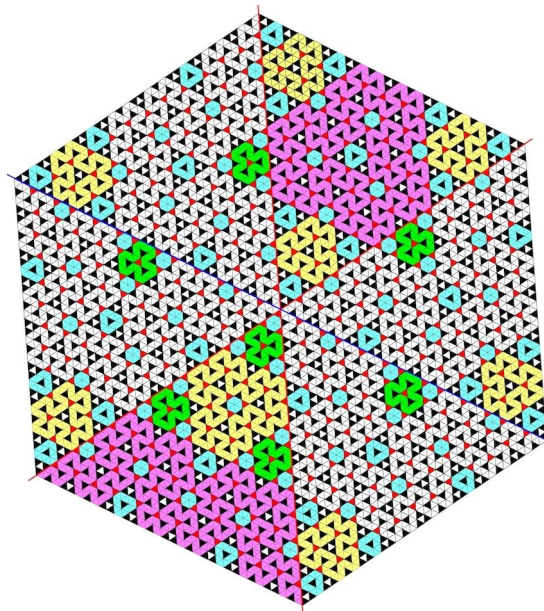
Досі нема загальної згоди щодо ролі енергії й ентропії у стабілізації квазикристалічних структур. Енергетична стабілізація передбачає існування ідеальних квазикристалічних основних станів. Якщо ж переважає роль ентропії, то квазикристали можуть існувати лише за досить високих температур і переходять у періодичні кристали, якщо температура нижчає. Наші результати свідчать на користь енергетичної концепції стабілізації аперіодичних структур (в тому числі квазикристалічних).

Для опису квазикристалічних структур використовують математичну теорію аперіодичних замощень. Такого типу замощення розглядав ще Кеплер. В наш час вперше аперіодичне замощення було одержано французьким геометром Берже (1964 р.). Воно побудоване з так званих плиток Ванга. Щодо моделей ґраткового газу з аперіодичними основними станами, то вони виникли у 1980-их роках (зразу ж після відкриття квазикристалів). Однак усі ці моделі базуються на певних аперіодичних замощеннях і містять багато сортів частинок (щонайменше шістнадцять). Ми ж одержали упорядковані аперіодичні структури лише з одним сортом частинок.

Досі не з'ясовано механізм росту квазикристалічної структури. Математичні правила сумісності (*matching rules*) у теорії замощень призводять до нелокальності росту. З цього було зроблено висновок, що такі правила не є

фізичними, бо для формування досконалої квазикристалічної структури вони вимагають далекосяжних взаємодій. Згодом було показано, що замощення Пенроуза можна одержати, використовуючи локальний алгоритм росту, який відповідає короткосяжним взаємодіям. Модель, яку ми розглядаємо, містить лише взаємодії скінченного радіуса, а пороте механізм росту аперіодичних і навіть періодичних структур у цій моделі нелокальний. Цей механізм можна б назвати «фазонним», бо він полягає в тому, що дефекти, які неминуче виникають у процесі росту, самоусуваються завдяки послідовним фазонним перескокам частинок.

Існування континууму основних станів у нашій моделі доводить, що так звана нескінченна адаптативність, спостережувана у багатьох сполуках, може виникати в системах зі скінченим радіусом взаємодії. Це суперечить припущенню Кіттеля про те, що за нескінченну адаптативність відповідають далекосяжні взаємодії.



Результати досліджень опубліковано у статті
Yu I. Dublenych, *Continuum of ground-states and aperiodic structures in a lattice gas on the triangular lattice with finite-range interactions*, Phys. Rev. B **86**, 014201 (2012).

І. Загладько, А. Дувіряк

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
м. Львів, Україна*

МОДЕЛЬ ТИПУ ЮКАВИ В ТЕОРІЇ ПРЯМИХ ВЗАЄМОДІЙ: ПРОБЛЕМИ ПУАНКАРЕ-ІНВАРІАНТНОСТІ ТА УНІТАРНОСТІ МАТРИЦІ РОЗСІЯННЯ

Застосування методів релятивістичної теорії прямих взаємодій [1] до квантово-польових моделей дозволяє здійснити їх канонічне квантування без необхідності перенормувань (принаймні у нижчих пертурбативних наближеннях), і досить просто отримати оператор розсіювання та рівняння на зв'язані стани. Як приклад розглядається скалярна модель типу моделі Юкави. Вона описує динаміку двох комплексних скалярних полів, що взаємодіють за посередництвом дійсного скалярного поля. Розгляд ведеться у формалізмі частково редукованої теорії поля. Редукція поля-посередника у вихідному лагранжіані приводить до ефективного лагранжіану з нелокальним членом:

$$L = \sum_{r=1}^2 \left\{ (\partial_\mu \phi_r^*) (\partial^\mu \phi_r) - m_r^2 \phi_r^* \phi_r \right\} + \frac{1}{2} \int d^4 x \rho(x) K(x-x') \rho(x').$$

Перехід до гамільтонового формалізму в такому випадку є нетривіальною задачею і здійснюється за схемою, запропонованою в роботі [2]. Ця схема спирається на розвинуту для нелокальних лагранжіанів в механіці [3]. Така процедура здійснюється методом послідовних наближень і приводить до втрати явної коваріантності опису. Чи втрачається при цьому релятивістична інваріантність моделі – питання лишалось відкритим.

Ми розглядаємо гамільтонове формулювання редукованої теоретико-польової моделі в найнижчому наближенні (квадратичному за константою взаємодії) і доводимо її пуанкаре-інваріантність. Для цього, на основі знайдених раніше [2] нелокальних нетериних інтегралів руху, будуюмо їхні гамільтонові відповідники та здійснюємо їх квантування.

Для гарантування Пуанкаре-інваріантності знайдені оператори повинні задовольняти комутаційні співвідношення алгебри Пуанкаре. Після перевірки з'ясовується, що в даному наближенні знайдені величини справді є генераторами цієї групи, тобто можна говорити про релятивістичну інваріантність розглядуваної моделі.

В ході обрахунків також зауважено, що наявність чи відсутність нормального впорядкування у виразах для генераторів не впливає на результат обчислення їх комутаторів. А комутаційні співвідношення зберігаються навіть коли у канонічних генераторах враховувати лише члени взаємодії з даним фіксованим числом операторів народження і знищення. Це можна інтерпретувати таким чином: Пуанкаре-інваріантність зберігається як у кожній задачі про зв'язані стани, так і в кожному каналі задачі розсіювання.

Вартим уваги є також питання побудови унітарної матриці розсіювання для такої моделі. Вважається, що через нелокальність у лагранжіані взаємодії така задача

є проблематичною. Для даної роботи ми будували матрицю розсіяння так, як це робиться у квантовій механіці та отримали для неї такий вираз:

$$S = 1 + \frac{i}{2} \sum_{ab} \sum_{ABCD} \int d^3k d^3q d^3u d^3v T_{ab}^{ABCD}(\vec{k}, \vec{q}, \vec{u}, \vec{v}) \delta(Ak_{a0} + Bq_{a0} + Cu_{b0} + Dv_{b0}) : a_{ka}^A a_{qa}^B a_{ua}^C a_{va}^D :$$

Її унітарність доводимо, показуючи ермітовість так званого оператора фази, що стоїть після уявної одиниці в другому доданку. Обрахунки свідчать, що така матриця справді унітарна.

1. *Relativistic Action at a Distance: Classical and Quantum Aspects*. Llosa J. ed. (Springer, Berlin, 1982)
2. A. Duviryak and J.W. Darewych, *J Phys. A: Math. Gen.* **37**, 8365 (2004).
3. J. Llosa and J. Vives, *J. Math. Phys.* **35**, 2856 (1994).

Борис Рувінський¹, Марк Рувінський²

¹Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу,

²Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна

**ОПТИЧНА ПРОЗОРИСТЬ ДОПОВАНОГО ГРАФЕНУ У
ПОСТЛІНІЙНОМУ ВІДГУКУ**

В роботі [1] методом матриці густини визначено міжзонну провідність допованого графену з виходом за межі теорії лінійного відгуку. Отримані залежності міжзонного струму від частоти зовнішнього електричного поля, температури і хімпотенціалу графену. Підтверджено в загальних умовах важливу роль резонансного характеру міжзонних переходів в достатньо сильних електричних полях і при малих частотах, з'ясована в теорії Міщенко [2] для випадку нульових значень температури та енергії Фермі. Для допованого графену знайдено амплітуди насичення дисипативної і недисипативної частин міжзонного струму.

Проведемо узагальнення результатів роботи [2] з теорії оптичної прозорості від нульових значень температури і хімічного потенціалу до довільних значень θ і μ для допованого графену (θ – абсолютна температура в енергетичних одиницях).

Нехай падаюче електромагнітне випромінювання поширюється вздовж від'ємного напрямку осі z перпендикулярно до площини xy графену з лінійною поляризацією вздовж осі x . Електричне поле складається з падаючої E_0 і відбитої E_R хвиль при $z > 0$, і хвилі E_T , що пройшла через площину графену при $z < 0$:

$$E = \begin{cases} E_0 \cos(\omega t + \frac{\omega z}{c}) + E_R \cos(\omega t - \frac{\omega z}{c}), & z > 0 \\ E_T \cos(\omega t + \frac{\omega z}{c}). & z < 0 \end{cases} \quad (1)$$

Хвильове рівняння з двовимірним струмом у площині графену $z = 0$ має вигляд

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial j_d}{\partial t}, \quad (2)$$

де

$$j_d(z, t) = \frac{2\sigma_0 E_T \cos \omega t}{\sqrt{1 + \zeta_T^2} + 1} G\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) \cdot \delta(z) \quad (3)$$

– дисипативна частина густини міжзонного струму [1],

множник
$$G\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) = \frac{\text{sh}(\hbar\omega / 2\theta)}{\text{ch}(\mu / \theta) + \text{ch}(\hbar\omega / 2\theta)}, \quad (4)$$

$\sigma_0 = e^2 / 4\hbar$, $\zeta_T = (euE_T / \hbar\omega\Gamma)$ у відповідності з електричним полем E_T у

площині графену.

Врахуємо граничні умови:

$$E_0 + E_R = E_T, \quad (5)$$

$$E_R - E_0 + E_T = -\frac{2\pi\alpha E_T}{\sqrt{1+\zeta_T^2+1}} G\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right). \quad (6)$$

Отримано алгебраїчне рівняння для коефіцієнта трансмісії $T = (E_T^2 / E_0^2)$ в допованому графені ($\alpha = e^2 / \hbar c$ – стала тонкої структури)

$$1 + \frac{\pi\alpha G(\hbar\omega/2)}{1 + \sqrt{1+T \cdot I}} = \frac{1}{\sqrt{T}}, \quad (7)$$

яке визначає залежність T від ефективної інтенсивності $I = (euE_0 / \hbar\omega\Gamma)^2 \equiv \zeta_0^2$ падаючого випромінювання. З (7) випливає додаткова залежність через $G(\hbar\omega/2)$ оптичної прозорості T від частоти, температури і хімічного потенціалу (концентрації вільних носіїв заряду). Ефективна інтенсивність I суттєво залежить від частоти, як безпосередньо, так і через обернений час життя $\Gamma(\omega)$ електронів і дірок, який визначається механізмами розсіяння. Додаткова залежність струму насичення від $G(\hbar\omega/2)$ ускладнює встановлення однозначного зв'язку частотної залежності струму насичення і механізму розсіяння для допованого графену на відміну від випадку ідеально чистого графену при нульових значеннях температури та енергії Фермі.

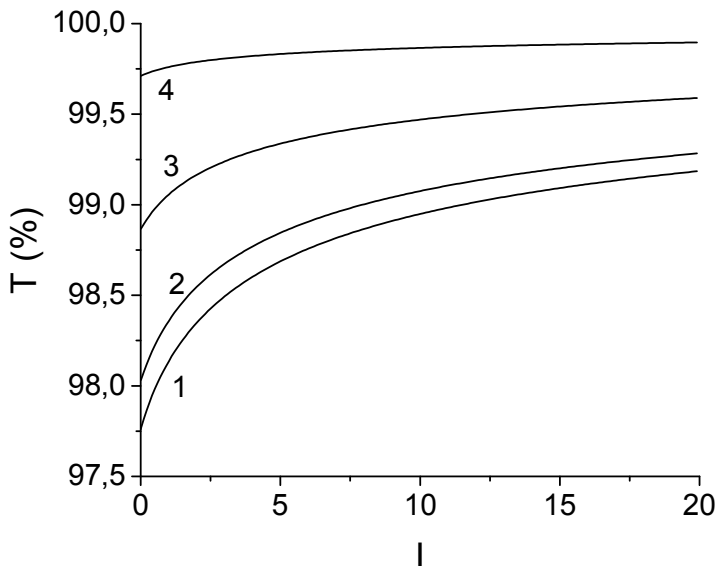


Рисунок 1 - Залежність коефіцієнта трансмісії T підвищеного графену від ефективної інтенсивності падаючого випромінювання I при температурі 300 К, $\hbar\omega = 0,3$ еВ і хімічних потенціалах μ .

На рис. 1, 2 наведено графічні залежності коефіцієнтів трансмісії T від ефективної інтенсивності I падаючого випромінювання, розраховані на основі рівняння (7). Рис. 1 містить теоретичні криві $T(I)$ при фіксованій температурі 300К, $\hbar\omega = 0,3$ еВ і різних значеннях хімічних потенціалів (з відповідними концентраціями вільних носіїв заряду n_0). Криві $T(I)$: 1 – $\mu = 0,01$ еВ, $n_0 = 5,3 \cdot 10^{10}$ см⁻²; 2 – $\mu = 0,10$ еВ, $n_0 = 8,9 \cdot 10^{11}$ см⁻²; 3 – $\mu = 0,15$ еВ, $n_0 = 1,8 \cdot 10^{12}$ см⁻²; 4 – $\mu = 0,20$ еВ, $n_0 = 3,1 \cdot 10^{12}$ см⁻².

На рис. 2 представлені залежності $T(I)$ при фіксованому хімічному потенціалі, $\hbar\omega$ і різних температурах. З ростом хімічного потенціалу і температури відбувається зростання коефіцієнта трансмісії. В усіх випадках прозорість підвішеного допованого графену визначається добутком сталої тонкої структури α і функції $G(\hbar\omega/2)$, набуваючи великих значень навіть при низьких інтенсивностях. Згідно [3], при $I \rightarrow 0$ спостерігається лінійна залежність $T(I)$ і досягається значення $T(0) = 97.7\%$. Із збільшенням інтенсивності, як і в [2], теоретично передбачається перехід у нелінійний режим, а потім досить повільна зміна $T \rightarrow 1$ відповідно до $T \approx 1 - (2\pi/\sqrt{I}) \cdot \alpha G(\hbar\omega/2)$ (для ідеально чистого графену [2] $G(\hbar\omega/2) = 1$). Поки ще не існує систематичних експериментальних досліджень нелінійних ефектів прозорості графену в достатньо сильних електричних полях і при низьких частотах.

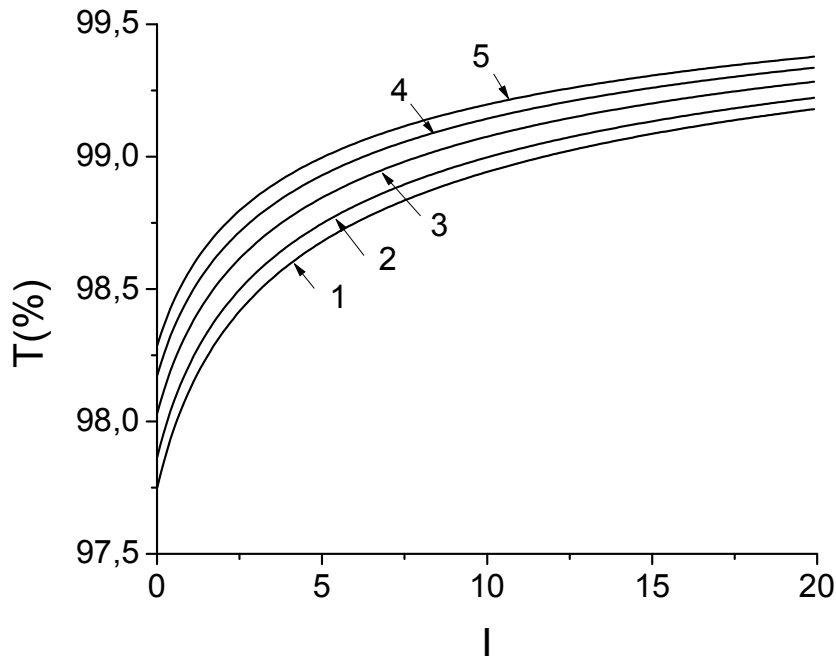


Рисунок 2 - Криві $T(I)$ при хімічному потенціалі $\mu = 0,10$ еВ, $\hbar\omega = 0,3$ еВ, температурах і концентраціях n_0 :

- 1 – 100 К, $n_0 = 7,5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$; 2 – 200 К, $n_0 = 8,1 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$;
3 – 300 К, $n_0 = 8,9 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$; 4 – 400 К, $n_0 = 1,0 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$;
5 – 500 К, $n_0 = 1,1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$.

1. Б.М. Рувінський, М.А. Рувінський, Фізика і хімія твердого тіла **13**, 325 (2012).
2. E.G.Mishchenko, Phys.Rev.Lett. **103**, 246802 (2009).
3. R.R. Nair, P. Blake, A.N. Grigorenko *et al.*, Science **320**, 1308 (2008).

УДК 539.2, 537.311.3

Валерій Швець, Сергій Козицький, Олександр Заянчуковський

*Одеська національна академія харчових технологій,
м. Одеса, Україна*

РІВНЯННЯ СТАНУ МЕТАЛІЧНОГО ГЕЛІЮ

В роботі розрахована парна ефективна міжіонна взаємодія, вільна енергія, тиск і електричний опір в рідкому металічному гелії в широкому діапазоні густин і температур. Для всіх зазначених характеристик металу використана теорія збурень за потенціалом електрон-іонної взаємодії. Для електронів провідності використане наближення випадкових фаз при врахуванні обмінної взаємодії і кореляцій електронів провідності у наближенні локального поля. Для іонної підсистеми використана модель твердих сфер. Діаметр цих сфер є єдиним параметром теорії. Оцінка діаметру і густини системи, при якій відбувається перехід гелію із одноразово- у дворазово іонізований стан, проведена на основі аналізу парної ефективної взаємодії між іонами гелію. В роботі розглянутий випадок дворазово іонізованих атомів гелію. При чисельних розрахунках враховані члени теорії збурень до третього порядку включно. Роль поправки третього порядку у всіх випадках значна. Значення електричного опору та його температурної залежності для металічного гелію мають значення, характерні для двовалентних рідких металів. Значення термодинамічних параметрів: густини, температури і тиску вкладаються в діапазон значень, характерних для центральних областей планет гігантів. Це дозволяє припустити існування гелію в металічному стані в межах сонячної системи.

УДК 539.2, 537.311.3

Валерій Швець, Сергій Козицький, Олександр Заянчуковський

*Одеська національна академія харчових технологій,
м. Одеса, Україна*

МЕТАЛІЧНИЙ ГЕЛІЙ І ВНУТРІШНЯ БУДОВА ЮПІТЕРА

Запропоноване мікроскопічне рівняння стану суміші металічного водню і гелію. Досліджений інтервал тисків, температур і густин, характерний для Юпітера. Всередині Юпітера виділені чотири області і встановлені їх межі: область, що містить металічний водень і дворазово іонізований гелій, область, що містить металічний водень і одноразово іонізований гелій, область, що містить металічний водень і атомарний гелію і область, що містить молекулярний водень і атомарний гелій. У даній роботі розглянуті перші три області. Для знаходження рівняння стану зазначених сумішей використана теорія збурень за електрон-іонною взаємодією іонів двох сортів. Електронні підсистема розглядається у наближенні випадкових фаз. Взаємодія між іонами враховується у наближенні твердих сфер. Для моделювання внутрішньої структури Юпітера використана модель політропних куль. Зроблений висновок про наявність в центральній області Юпітера металічного гелію і визначена його концентрація. Область металізації гелію сягає половині радіусу Юпітера. В центрі планети маса металічного гелію суттєво переважає масу металічного водню.

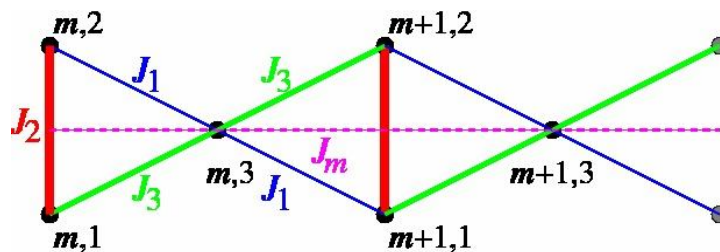
УДК 538.9

Олеся Крупницька

*Львівський національний університет ім. Івана Франка,
м. Львів, Україна*

НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ ДЕФОРМОВАНОГО РОМБІЧНОГО СПІНОВОГО ЛАНЦЮЖКА У СИЛЬНОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ

Розглядатимемо термодинамічні властивості $s=1/2$ моделі Гайзенберга на ромбічному ланцюжку з чотирьома різними константами антиферромагнітної взаємодії J_1, J_2, J_3, J_m .



Якщо $J_1 = J_3 \leq \frac{J_2}{2}$ і $J_m = 0$, то у сильному магнітному полі термодинаміку такої системи можна описати у термінах незалежних локалізованих магнонів, див. [1]. У випадку відхилення від цієї геометрії ми дещо модифікуємо цей опис, в результаті чого отримуємо вираз для вільної енергії при низьких температурах і великих полях. Також обговорюємо криву намагнічення і магнітокалоричний ефект для ідеального і деформованого ромбічного ланцюжка при низьких температурах і великих полях.

Ми також обговорюємо застосовність такого опису для азуриту, який описується моделлю деформованого ромбічного ланцюжка, див. [2].

Ці дослідження були виконані разом з О. Держком (ІФКС, Львів) і Й. Ріхтером (Магдебурзький університет).

1. J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, J. Richter, and H.-J. Schmidt, Phys. Rev. Lett. **88**, 167207 (2002).
2. H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, and H. Ohta, Phys. Rev. Lett. **94**, 227201 (2005).

УДК 536.4, 537.6, 538.9

Роман Романік, Михайло Козловський
*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
м. Львів, Україна*

ТЕРМОДИНАМІЧНІ ФУНКЦІЇ ТРИВИМІРНОЇ ІЗІНГОПОДІБНОЇ МОДЕЛІ В ЗОВНІШНЬОМУ ПОЛІ

Розглядається система ізінгівських спінів на простій кубічній ґратці при наявності зовнішнього поля. Досліджується поведінка системи поблизу критичної точки за допомогою виключно аналітичних розрахунків. В якості математичного апарату для обчислення термодинаміки моделі використано метод колективних змінних [1]. Основна увага приділяється питанню впливу зовнішнього магнітного поля на критичну поведінку. Розрахунок статистичної суми здійснюється з використанням негаусових розподілів флуктуацій параметра порядку. На основі отриманого виразу для статистичної суми розраховуються інші фізичні характеристики системи, такі як: вільна енергія Гіббса і вільна енергія Гельмгольца, параметр порядку [2], сприйнятливості тощо. Всі величини виражаються в явному вигляді як функції приведеної температури, зовнішнього поля і мікроскопічних параметрів гамільтоніану.

Особливістю теорії є отримання так званої петлі Ван дер Ваальса в некласичній формі, що робить можливим оцінку областей стабільності, метастабільності і нестабільності для розглядуваної моделі на площині «параметр порядку – температура». Зроблено порівняння з результатами інших теорій, зокрема з результатами роботи [3] для некласичної форми петлі Ван дер Ваальса в системах з однокомпонентним параметром порядку.

1. I.R. Yukhnovskii, La Rivista del Nuovo Simento **12**, 1 (1989).
2. M.P. Kozlovskii and R.V. Romanik, J. Condens. Matter **14**, 43002 (2011).
3. M.E. Fisher et al., Phys. Rev. B **59**, 14533 (1999).

УДК 53.01, 532.5, 538.9

В’ячеслав Купоров

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
м. Львів, Україна*

ДИНАМІКА БІНАРНИХ НЕЙТРАЛЬНИХ ТА ІОННИХ РІДИН: ПІДХІД УЗАГАЛЬНЕНИХ КОЛЕКТИВНИХ МОД І ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ

В рамках підходу узагальнених колективних мод задача на обчислення спектру колективних збуджень і часових кореляційних збуджень системи зводиться до задачі на власні значення і власні вектори узагальненої гідродинамічної матриці з відомими матричними елементами. При цьому для забезпечення високої точності в усій області просторових і часових масштабів виникає необхідність у розгляді динамічних моделей з великою кількістю динамічних змінних, що приводить до ускладнення розрахунків, які завжди можна провести чисельно, проте аналітичне дослідження стає доволі складним. Останнє ж вкрай важливе для з’ясування механізмів, що приводять до тих чи інших сценаріїв динамічної поведінки. Тут можуть прийти на допомогу наближені аналітичні методи і одна з таких альтернатив полягає у розвитку динамічної теорії збурень у матричній формі.

Існує два шляхи у розвитку такої теорії. Перший передбачає розклад узагальненої гідродинамічної матриці поблизу гідродинамічної границі і обчислення спектру колективних збуджень у вигляді розвинень за малим хвильовим числом. Він годиться тоді, коли ми зацікавлені у результатах поблизу гідродинамічної області. Інший – це побудова теорії збурень за недиагональними кореляторами, що дозволяє розбити задачу на кілька простіших задач меншої розмірності, які часто добре описують основні риси динаміки в певних просторових та часових ділянках. Нами побудовано загальний формалізм такої теорії і проведено її апробацію на деяких відомих динамічних моделях простої рідини [2]. У цій доповіді буде продемонстровано результати використання динамічної теорії збурень до вивчення динаміки бінарних сумішей нейтральних і заряджених частинок та проведено порівняння між цими двома випадками. Буде розглянута найпростіша, чотири-змінна модель поперечної динаміки такої системи, де з допомогою теорії збурень можна шукати внески до поперечних мод від перехресних кореляцій між густинними та мас-концентраційними змінними.

1. I.M. Mryglod, *Condens. Matter Phys.* **1**, 753 (1998); I. Mryglod, T. Bryk, V. Kuporov, in: *Ionic Soft Matter: Modern Trends in Theory and Applications*, NATO Science Series **II 206**, 109 (2005).
2. I.M. Mryglod, V.M. Kuporov, *Ukr. J. Phys.* **55**, 1172 (2010).

УДК 538.9

Леонід Дідух, Юрій Довгоп’ятий, Олександр Крамар, Юрій Скоренький
*Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,
м. Тернопіль, Україна*

МОДИФІКОВАНА ФОРМА ПОЛЯРНОЇ МОДЕЛІ: ЕФЕКТИ МІЖЕЛЕКТРОННИХ ВЗАЄМОДІЙ

Загальні теоретичні міркування та спостережувані особливості фізичних властивостей матеріалів з вузькими зонами провідності (оксиди, сульфідиди та селеніди перехідних металів) вказують на необхідність узагальнення відомої моделі Габбарда. Така узагальнена модель вузькозонного матеріалу може бути зображена гамільтоніаном [1, 2]:

$$H = -\mu \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} - \mu_B h \sum_i (a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow}) + \sum_{ij\sigma} t_{ij}(n) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_{ij\sigma} (J(iij) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + e.c.) + \\ + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{ij\sigma\sigma'} J(ijji) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma'}^+ a_{i\sigma} a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ij\sigma\sigma'} J(ijjj) n_{i\sigma} n_{j\sigma'}.$$

Тут введені наступні позначення: μ – хімічний потенціал, μ_B – магнетон Бора, h – напруженість магнітного поля, U – енергія кулонівського відштовхування двох електронів з протилежними спінами на одному і тому ж вузлі кристалічної ґратки ($U=J(iiii)$),

$$t_{ij}(n) = t(ij) + n \sum_{k \neq i, k \neq j} J(ikjk),$$

$t(ij)$ – “зонний” інтеграл переносу, n – середнє число електронів на вузол, $J(ijkl)$ – матричний елемент електрон-електронної взаємодії, побудований на функціях Ваньє, $a_{i\sigma}^+$ ($a_{i\sigma}$) – оператор народження (знищення) електрона із проекцією спіна σ (\uparrow, \downarrow) на i -тому вузлі кристалічної ґратки, $\bar{\sigma}$ означає проекцію спіна, протилежну до σ , $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$.

Важливою особливістю модельного гамільтоніана (1), яка відрізняє його від генетично пов’язаних з ним аналогів (полярна модель, модель Габбарда, модель Гірша, модель Ірхіна) є наявність в ньому ефективного інтеграла переносу, описуваного виразом (2), залежного від концентрації електронів. Врахування кореляційних інтегралів переносу $J(ikjk)$ приводить до наслідків, які дозволяють пояснювати низку особливостей фізичних властивостей матеріалів з вузькими енергетичними зонами.

В доповіді подані наступні результати досліджень моделі вузькозонного матеріалу, описуваного гамільтоніаном (1) (частково опубліковані в роботах [1-7]).

1. Отримані ефективні зображення гамільтоніана (1) для випадків слабкої та сильної внутрішньоатомних взаємодій. Якщо знехтувати міжатомними кулонівською та обмінною взаємодіями, то отримується своєрідна “несиметрична” модель Габбарда, особливістю якої є, зокрема, відсутність електронно-діркової симетрії. Проаналізовані наслідки, які впливають із відсутності електронно-діркової симетрії у вузьких енергетичних зонах,

залежності ширин зон від ступеня їх заповнення. Отримані модифіковані форми t - J -моделей в яких, зокрема, умови для реалізації високих температур надпровідного переходу є більш сприятливі, ніж у моделях, генетично пов'язаних із моделлю Габбарда.

2. На основі запропонованих методик отриманий енергетичний спектр електронів, який є точним у зонній та атомній границях, дозволяє описати перехід діелектрик-метал під дією зовнішнього тиску а також спостережуваний у вузькозонних матеріалах перехід парамагнітного металу у стан парамагнітного діелектрика при підвищенні температури (наприклад, у сполуках NiS_2 , $(\text{V}_{1-x}\text{Cr})_2\text{O}_3$). Особливістю спектру є його залежність від концентрації полярних станів (і від температури), що вказує на можливість специфічних “вузькозонних” ефектів, які дають змогу керувати переходом діелектрик-метал за допомогою легування, електричного та магнітного поля та через фотоэффект.

3. Показано, що тип провідності вузькозонної системи в режимі легованого мотт-габбардівського діелектрика у випадку зміни концентрації електронів від 0 до 2 змінюється тричі. Отримана залежність провідності від ступеня заповнення зони. Отримані результати можуть пояснити зміну типу провідності, спостережувану у VO_x та $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_3$.

4. Отримано, що в легованих мотт-габбардівських сполуках енергія активації повинна різко змінюватися поблизу $n=1$ (за рахунок корельованого переносу). Така різка зміна енергії активації дійсно спостерігається у сполуках $\text{Mn}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$, $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$.

5. Для випадку слабких та помірних внутрішньоатомних взаємодій розрахована залежність енергії зв'язку від ступеня заповнення зони. Отримана залежність пояснює особливості залежності енергії зв'язку від атомного номера в перехідних металах – мінімум для Mn і наявність двох нееквівалентних максимумів (V, Co), а також залежності від атомного номера в перехідних металах температури плавлення та температурного коефіцієнта лінійного розширення.

6. Розраховані на основі гамільтоніана (1) температури Кюрі і Нееля застосовані для пояснення спостережуваних концентраційних залежностей температури Кюрі в дисульфідах перехідних металів та температури Нееля у високотемпературних надпровідних матеріалах і фазах Магнелі.

7. Розраховані енергетичний спектр та температура Вервея для фаз Магнелі ванадію, які дозволяють пояснити спостережувані температури переходу в цих матеріалах із діелектричного стану у металічний.

8. Сформульований ефективний гамільтоніан електронної підсистеми фулеридів у конфігураційному представленні, який враховує конкретні типи обмінних взаємодій, важливих для стабілізації магнітних впорядкувань, та трикратне орбітальне виродження, характерні для цих сполук. Побудований гамільтоніан дозволяє класифікувати процеси локалізації та делокалізації електронів.

9. Сформульована теоретична модель андерсон-габбардівського матеріалу із врахуванням особливостей кореляційних ефектів у вузьких зонах має ширшу область застосовності, ніж стандартна $s-d$ модель; зокрема, модельний гамільтоніан не тільки враховує основні типи взаємодій у вузькій орбітально невірродженій зоні, але й коректно описує ефекти непрямого переносу та непрямого обміну і може бути застосований до розгляду властивостей систем з квантовими точками. Узагальнено метод канонічного перетворення на випадок періодичної моделі Андерсона. Отримано критерій переходу метал-діелектрик при цілому значенні концентрації електронів в системі.

10. На основі нового варіанту наближення середнього поля розрахований енергетичний спектр електронів в моделі Хаббарда у двополюсному наближенні. Отриманий спектр є температурно-залежним, точним в атомній і зонній границях, відтворює хартрі-фоківський спектр у випадку слабких внутрішньоатомних взаємодій та спектр електронів, розрахований за теорією збурень у випадку сильних внутрішньоатомних взаємодій, дозволяє описати перехід діелектрик-метал. Показано, що послідовне врахування переходів вузол \leftrightarrow хаббардівська зона приводить не лише до зсувів атомних рівнів, але і до їх розмиття; тут є певна аналогія з допоміжною одновузловою задачею в теорії динамічного середнього поля.

11. Запропонована спінон-діркова модель для опису електричних і магнітних властивостей антиферомагнетиків типу оксидів і селенідів перехідних металів. Отримано, що зростання температури приводить до зростання провідності з максимумом в точці Нееля. При фазовому переході антиферомагнетизм-парамагнетизм першого роду може відбутися різке зростання провідності. Саме така ситуація спостерігається в антиферомагнітних оксидах.

12. Як розвиток теорії металічного феромагнетизму в узагальненій моделі Габбарда при реалістичних формах незбуреної густини станів було узагальнено підхід для розрахунку статичної електропровідності та ефективних мас носіїв струму на випадок спінової поляризації системи та розраховано транспортні характеристики в моделі з двократним орбітальним виродженням та реалістичною густиною енергетичних станів.

1. Л.Д. Дідух, Журн. Фіз. досл. **1**, 241 (1997).
2. L. Didukh, Acta Phys. Pol. B **31**, 3097 (2000).
3. L. Didukh, Yu. Skorenky, V. Hankevych, O. Kramar, Phys. Rev. B **64**, 144428 (2001).
4. L. Didukh, O.Kramar and Yu.Skorenky, in: *New Developments in Ferromagnetism Research*. Ed.: V.N. Murray (Nova Science Publishers Inc., New York, 2005), pp. 39-80.
5. Didukh L., Skorenky Yu., Kramar O. Condens. Matter Phys. **11**, 443 (2008).
6. Yu. Dovhopyaty, L. Didukh, O. Kramar, Yu. Skorenky, Yu.Drohobitsky, Укр. фіз. журн. **57**, 920 (2012).
7. Yu. Skorenky, L. Didukh, O. Kramar, Yu. Dovhopyaty, E-print cond-mat/1112.6325 [прийнято до друку в Acta Physica Polonica B, 2012].

УДК 537.9

Олександр Крамар

*Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,
 м. Тернопіль, Україна*

ВПЛИВ ФОРМИ ГУСТИНИ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ НА ХІМІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ В УЗАГАЛЬНЕНІЙ МОДЕЛІ ГАББАРДА

У роботі досліджено поведінку хімічного потенціалу як функції температури та параметрів узагальненої моделі Габбарда з корельованим переносом при різних формах незбуреної густини електронних станів (ГС). З використанням розрахованого [1] квазічастинкового енергетичного спектру, який враховує кореляційне звуження α та трансляційний зсув β центра підзони, у парамагнітному випадку проведено числовий розрахунок хімічного потенціалу на основі виразу:

$$\frac{n}{2-n} = \int_{-w(n)}^{w(n)} \frac{\rho(t)dt}{\exp\left(\frac{-\mu + \alpha t + \beta - zJ_{eff}n/2}{\Theta}\right) + 1},$$

де n – концентрація електронів у квазічастинковій підзоні, $w(n)$ – концентраційно залежна (за рахунок корельованого переносу [2]) ширина підзони, $\rho(t)$ задає форму незбуреної ГС, $\Theta = k_B T$.

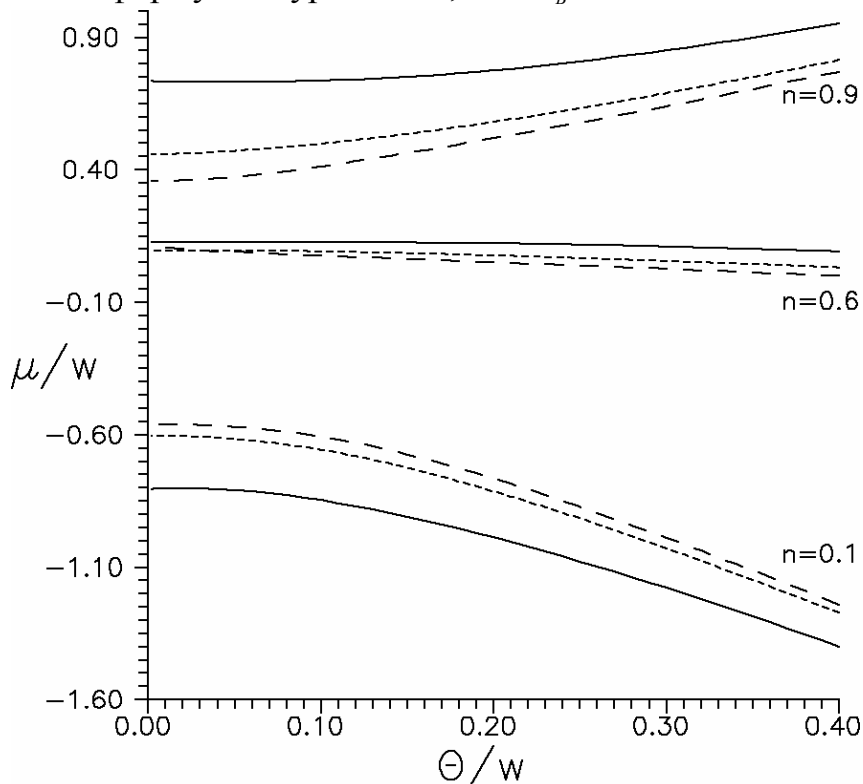
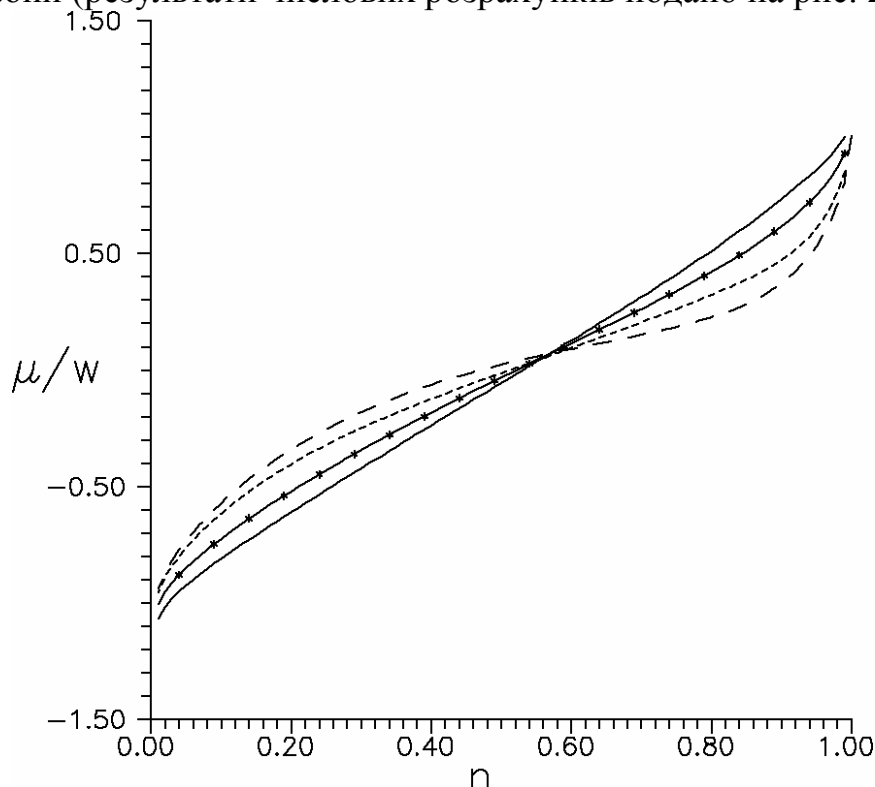


Рисунок 1- Температурна залежність хімічного потенціалу при різних концентраціях електронів. Суцільні криві відповідають прямокутній ГС, криві з коротким штрихом – ГС sc-гратки, криві з довгим штрихом – ГС bcc-гратки.

Виявлено певні особливості властивостей хімічного потенціалу для систем з напівеліптичною ГС, ГС з асиметрією на краю зони та ГС ґраток кубічної симетрії (*sc* та *bcc*) порівняно з результатами для прямокутної ГС. Зокрема з температурної залежності видно (рис. 1), що для довільної форми ГС зміни значення хімічного потенціалу є тим більш суттєві, чим вищою є температура та чим сильніше заповнення зони n відрізняється від половинного. Разом з тим, при низьких температурах хімічний потенціал залежить від температури слабо. Це дозволяє використовувати в оцінках низькотемпературних характеристик моделі значення хімічного потенціалу основного стану. У роботі показано також, що при використанні асиметричної ГС [3] зростання параметра асиметрії a приводить до помітного зсуву хімічного потенціалу до нижнього краю підзони. Відзначимо також, що при малих концентраціях у випадку низьких температур і сильно асиметричної ГС хімічний потенціал лежить нижче, ніж для прямокутної ГС. В низькотемпературній області відхилення μ/w для реалістичних ґраток від модельної прямокутної ГС є мінімальним при концентрації $n \cong 0,6$, в той час коли у високотемпературній області при цій же концентрації відхилення є максимальним. Більшість специфічних вузькозонних термо-магніто-електричних ефектів виникає при контакті матеріалів з різними значеннями концентрації електронів (а отже - і хімічного потенціалу). В зв'язку з цим викликає інтерес дослідження поведінки хімічного потенціалу від ступеня заповнення зони (результати числових розрахунків подано на рис. 2).



Риунок 2 – Концентраційна залежність хімічного потенціалу при фіксованій температурі $\Theta/w = 0,05$. Суцільна крива відповідає прямокутній ГС, суцільна крива з крапками - напівеліптичній ГС, крива з коротким штрихом – ГС *sc*-ґратки, крива з довгим штрихом – ГС *bcc*-ґратки.

Концентраційна залежність хімічного потенціалу в даній моделі є несиметричною відносно половинного заповнення. Особливості поведінки залежності $\mu(n, T)$ визначаються впливом трьох основних факторів: температури, кореляційного зсуву центра зони і ефективного обміну J_{eff} . При зростанні температури хімічний потенціал в області електронної провідності зменшується, а в області діркової провідності - зростає. Кореляційний зсув має немонотонну залежність від електронної концентрації, максимум якої лежить в області максимуму провідності. Обмінний зсув має лінійну залежність від концентрації, отже є найбільш помітним в більш ніж напівзаповненій підзоні, причому кореляційний та обмінний зсуви мають різний знак. Показано, що температурний фактор практично не проявляється в області переходу від електронного до діркового типу провідності і є найбільш значним в майже порожній підзоні (газова границя) чи майже заповненій підзоні $n \rightarrow 1$.

1. L. Didukh, O. Kramar, *Condens. Matter Phys.* **8**, 547 (2005).
2. L. Didukh, *Condens Matter Phys.* **1**, 125 (1998).
3. J. Wahle, N. Blumer, J. Schlipf, K. Held, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **58**, 12749 (1998).

УДК 538.953, 538.955

Богдан Лісний

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України
м. Львів, Україна*

ОСНОВНИЙ СТАН І ТЕРМОДИНАМІКА СПІН-1/2 АСИМЕТРИЧНОГО РОМБІЧНОГО ЛАНЦЮЖКА ІЗІНГА- ГАЙЗЕНБЕРГА

Розглянуто основний стан і термодинаміку спін-1/2 асиметричного ромбічного ланцюжка Ізінга-Гайзенберга [1], який належить до декорованих систем. У випадку XYZ анізотропної взаємодії Гайзенберга за допомогою декоративно-ітераційного перетворення точно розраховано вільну енергію, ентропію, теплоємність, намагніченості спінів Ізінга і Гайзенберга та магнітну сприйнятливості. У випадку антиферромагнітної XXZ взаємодії Гайзенберга і антиферромагнітної взаємодії Ізінга, коли в системі є геометрична фрустрація, вивчено основний стан, польову і температурну залежності намагніченості, температурну залежність у нульовому полі магнітної сприйнятливості та теплоємності. З'ясовано вплив асиметрії взаємодії Ізінга, яка діє на зв'язках вздовж сторін ромба і описується двома параметрами, і параметрів взаємодії Гайзенберга (J, Δ) на ці характеристики.

Дана геометрично фрустрована система має чотири основні стани: насичений парамагнітний стан (SPA), феримагнітний стан (FRI), ненасичений парамагнітний стан (UPA) і вузловий антиферромагнітний стан (NAF). Її фазова діаграма основного стану в площині (параметр асиметрії взаємодії Ізінга, магнітне поле) має три типові топології. Зміна параметрів взаємодії Гайзенберга в режимі $J(1+\Delta)=const$ зміщує на цій фазовій діаграмі границю області стану NAF не змінюючи топології. Зміна топології фазової діаграми основного стану (параметр асиметрії взаємодії Ізінга, магнітне поле) у залежності від параметрів взаємодії Гайзенберга (J, Δ) зображується відповідною діаграмою. В основному стані на зв'язку Гайзенберга достатньо сильні квантові флуктуації витісняють ефект геометричної фрустрації системи (енергія зв'язка стає мінімальною).

Якщо квантові флуктуації посилюються, то в області середніх і високих температур сумарна намагніченість і намагніченість спінів Гайзенберга збільшуються, а намагніченість спінів Ізінга зменшується. При цьому магнітна сприйнятливості у нульовому полі зростає. Температурна залежність теплоємності в нульовому полі на певному проміжку значень параметра асиметрії взаємодії Ізінга має головний і низькотемпературний максимуми. Також на цьому проміжку значень у достатньо малому околі критичної точки $FRI \leftrightarrow NAF$, теплоємність має біля нуля температур другий низькотемпературний максимум.

1. Б.М. Лісний, Укр. фіз. журн. **56**, 1238 (2011).

УДК 669.788

Ірина Наговська, Віта Прокоп'юк, Роман Іваницький

Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України,
м. Львів, Україна

ФІЗИЧНИЙ МЕХАНІЗМ ВПЛИВУ ВОДНЮ НА КОНСТАНТУ МАГНІТОСТРИКЦІЇ ФЕРИМАГНІТНИХ СПЛАВІВ НА ОСНОВІ *d*-ПЕРЕХІДНИХ ТА РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНИХ МЕТАЛІВ

Сьогодні особлива увага дослідників спрямована на розробку нових магнітних матеріалів на основі сплавів *d*-перехідних (Fe, Co) та рідкісноземельних металів (РЗМ: Nd, Sm, Dy, Tb). Як технологічне середовище при їх обробці часто застосовують водень. При цьому наводнювання сплавів на основі РЗМ може приводити як до зростання, так і до зменшення величини обмінної електронної взаємодії, яка визначає їх магнітні характеристики. Особливо це стосується константи магнітострикції ($\lambda = \Delta l / l$, де Δl – видовження зразка за накладання магнітного поля, а l – його довжина).

У роботі λ визначалася оптичним методом за допомогою інтерферометра Майкельсона. Об'єктом дослідження вибрали феримагнітний сплав Du_2Fe_{17} , взаємодія якого з воднем описується реакцією: $Du_2Fe_{17} + H_2 \rightarrow DuH_x + Fe$,

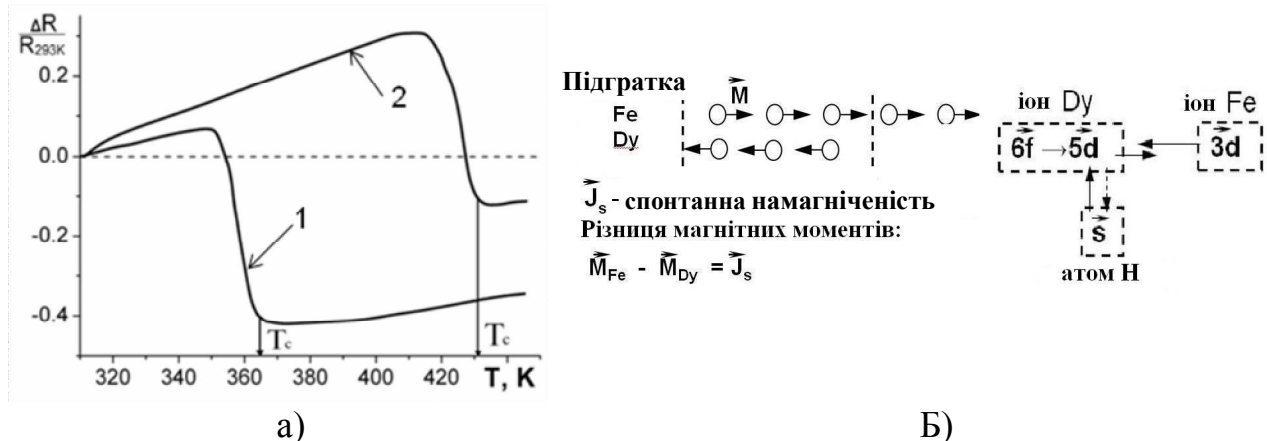


Рисунок 1 - Вплив водню на електроопір сплаву Du_2Fe_{17} (а: 1 – вакуум, 2 – водень) і схема електронної взаємодії за утворення гідриду DuH_x (б).

внаслідок якої вихідна структура сплаву розпадається з утворенням гідриду диспрозю та чистого заліза. При цьому λ зростає від 540 до $660 \cdot 10^{-6}$, що можна пояснити наступним чином. Електронна структура сплаву Du_2Fe_{17} складається з двох магнітних підґраток – Fe і Dy з протилежно спрямованими магнітними моментами (рис. 1б), різниця яких створює результуючу намагніченість J_s , що відповідає температурі точки Кюрі 363 К (рис. 1а). За утворення гідриду DuH_x $5d$ – електрони Dy, які до цього взаємодіяли з $3d$ – електронами Fe, утворюють хімічні зв'язки з $1s$ – електронами H, внаслідок чого у сплаві зростає кількість некомпенсованих $3d$ – електронів Fe, що призводить до збільшення T_c наводненого сплаву Du_2Fe_{17} з 363 до 433 К (рис. 1а) і, як наслідок, зростання λ .

УДК 621.039.534.6

Надія Рацька

*Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка НАН України,
м. Львів, Україна*

ВПЛИВ ПАРАМЕТРІВ ОКСИДУВАННЯ НА СТРУКТУРНО- ФАЗОВИЙ СТАН ТА ВЛАСТИВОСТІ СПЛАВУ СИСТЕМИ Nb-Ti

На ніобії та його сплавах в окислювальних атмосферах та на повітрі уже при 200...300°C може утворюватись п'ятиоксид ніобію. У зв'язку з невідповідністю елементарних ґраток цього оксиду і ніобію об'єм поверхневих шарів матеріалу збільшується приблизно в 2,68 рази, він розтріскується та переходить у порошкоподібний стан. Тому легування ніобію направлене на створення поверхневого захисного шару і такого його хімічного складу, який би забезпечував захисні властивості тривалий час є актуальним. Титан підвищує його стійкість проти окиснення, змінює відповідні стадії за різних температур, впливає на структуру і властивості утвореної на поверхні оксидної плівки, однак, він понижує температуру плавлення, тобто негативно впливає на міцність і тому легування повинно бути збалансованим. За допомогою хіміко-термічної обробки, зокрема, оксидування, можна забезпечити необхідний рівень приповерхневого зміцнення матеріалу [1].

Нижче подано результати трибологічних і електрохімічних досліджень ніобіетитанового сплаву типу ВН з оксидною плівкою та проаналізовано його структурно-фазовий стан після ряду високотемпературних експозицій на повітрі.

Вивчали сплав ВН-10 із хімічним складом, мас. %: 40...45 Ti; 6,7...7,3 Al; 3,5...4,4 V; 1,8 Zr; 0,0018...0,24 C; 0,13 O; решта Nb. З холодновальцьованих листів завтовшки 1 мм вирізали квадратні зразки 10 × 10 × 1 мм і оксидували на повітрі в печі типу СНОЛ 1.6.2, 5.1/9-И у діапазоні температур 300...1100°C. Максимальне можливе відхилення $\pm 20^\circ\text{C}$. Фазовий склад визначали на дифрактометрі ДРОН-2 із застосуванням Fe_α -променів.

Корозійно-електрохімічну поведінку ніобію і сплаву системи Nb-Ti вивчали в 20% H_2SO_4 за кімнатної температури та вільного доступу повітря. Потенціали корозії та поляризаційні залежності ніобію та сплаву на його основі записували за допомогою потенціостата ПИ-50-1 зі швидкістю розгортки 2 мВ/с. Електродом порівняння служив насичений хлоридсрібний електрод, а допоміжним – платиновий електрод.

Зносотривкість досліджували реверсивним тертям без мащення за схемою «стрижень–площина» впродовж 20 год. Контртіло - гартована сталь 45 (HRC=58, 59). Знос зразка визначали зважуванням на аналітичній вазі ВЛА-200М з точністю 10^{-4} г.

Після ряду ізотермічних витримок за температур 300...1000°C на поверхні сплаву формується щільна, добре зчеплена з основою окалина.

Дифракційний спектр сплаву у вихідному стані свідчить про структуру твердого розчину титану в ніобії з параметром ґратки $a=0,32538$ нм. За температури 300°C інтенсивність піків змінюється і параметр ґратки дещо зростає до $a=0,32564$ нм. Після оксидування за температури 500 і 600°C спостерігається роздвоєння рефлексів і зміщення їх максимумів, що пов'язано з розпадом твердого розчину. Аналіз рентгенограм сплаву після оксидування за температури 1100°C показав, що рентгенівські лінії відповідають оксидам $\text{Ti}_{0,4}\text{Al}_{0,3}\text{Nb}_{0,3}\text{O}_2$ ($a=0,4596(1)$ нм) і TiNb_2O_7 ($a=2,0412(2)$ нм) (табл. 1).

Таблиця 1 - Параметр ґратки, потенціал корозії та інтенсивність зношування сплаву ВН-10

Матеріал	a , нм	$E_{\text{кор.}}$, В	I , $\text{кг}/\text{м}^2$
ВН-10 у вихідному стані	0,32538(6)	0,3021	$19,8081 \cdot 10^{-3}$
ВН-10 оксидований за 300°C	0,32564(6)	0,2335	$17,9052 \cdot 10^{-3}$
ВН-10 оксидований за 500°C	0,3298(6), 0,3257(2)	0,3212	$1,7624 \cdot 10^{-3}$
ВН-10 оксидований за 600°C	0,3281(5), 0,3256(2)	0,1246	$10,0269 \cdot 10^{-3}$
ВН-10 оксидований за 1100°C	0,4596(1), 2,0412(2)	0,1513	$18,1431 \cdot 10^{-3}$

Досліджували корозійну тривкість сплаву у вихідному стані і після оксидування у $20\% \text{H}_2\text{SO}_4$ із подальшим визначенням потенціалів корозії. Загалом, оксидування сплаву призводить до зміщення величини електродних потенціалів у область негативних значень, порівняно із сплавом у вихідному стані, що пов'язано із підвищеною мікрогетерогенністю і морфологією оксидних фаз, які підвищують площу контакту із розчином. Лише після оксидування сплаву за температури 500°C спостерігається зсув потенціалу корозії в позитивнішу область, що свідчить про його вищу корозійну тривкість, ніж за інших температур оксидування (табл. 1).

Вплив поверхневого зміцнення сплаву ВН-10 оксидуванням досліджували за умови реверсивного тертя без мащення. Найвищої зносотривкості досягнуто після оксидування за температури 500°C , оскільки знос матеріалу практично на порядок нижчий, ніж у вихідному стані. Після оксидування за температури 600°C масові втрати матеріалу від зношування удвічі нижчі, ніж неоксидованого. Підвищення температури оксидування призводить до суттєвого зниження зносотривкості сплаву (табл.).

Отже, при оксидуванні ніобієтитанового сплаву в діапазоні температур $300 \dots 1100^{\circ}\text{C}$ спостерігається зміна механізму окиснення і природа жаровини. Найкращі корозійні і трибологічні властивості сплаву забезпечуються після оксидування за температури 500°C , що зумовлено формуванням на поверхні дуже тонкої компактною не пористої оксидної плівки.

1. Е.М. Савицкий, Г.С. Бурханов, *Металловедение тугоплавких металлов и сплавов* (Наука, Москва, 1967), 323 с.

УДК 519.2, 537, 539

Ю.Г. Бачинський¹, П.В. Басістий¹, М.С. Наконечний²

¹*Тернопільський національний університет ім. Володимира Гнатюка,*

²*Тернопільський національний технічний університет ім. Івана Пулюя,
м. Тернопіль, Україна*

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МІКРОМАГНІТНОГО РОЗПОДІЛУ ПОВЕРХНІ ОДНОШАРОВОЇ ПЛІВКИ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Останнім часом зріс інтерес до магнітних наноматеріалів, що обумовлений великими потенційними можливостями їх практичного застосування. Розвиток обчислювальних можливостей сучасних комп'ютерів дозволяє вивчати властивості таких матеріалів, ґрунтуючись на чисельному вирішенні задач для моделей, що відображають мікродискретність середовища. Результати чисельних досліджень особливо цінні у випадках, коли практично неможливо отримати аналітичне рішення системи. Зокрема, широке поширення при чисельному моделюванні магнітних середовищ отримала модель на основі так званої дискретно-дипольної апроксимації. Відповідно до цієї моделі дискретне середовище розглядається як сукупність магнітних диполів (моментів), під якими в залежності від рівня деталізації і розв'язуваної задачі можуть розумітися як окремі спіни, так і магнітні моменти часток, на які розбивається середовище. В останньому випадку в якості часток можна розглядати самі наночастинки, мікрокристаліти та іншим чином сформовані області, в межах яких магнітний момент вважається однорідним.

В рамках дискретно-дипольної моделі задача полягає в визначенні рівноважного стану або рівноважної конфігурації розподілу магнітних моментів. До числа таких задач відносяться задачі дослідження статичних магнітних характеристик середовищ, наприклад, вивчення доменної структури або розрахунок петель гістерезису. Для вирішення даних задач найчастіше використовується метод молекулярної динаміки та метод Монте-Карло. Хороші результати по визначенню рівноважної конфігурації магнітних часток дає підхід, оснований на релаксації системи в відповідності з поведінкою її внутрішніх ефективних магнітних полів, що діють на кожен диполь. Для цього у випадковому порядку розраховується локальне поле на певному магнітному диполі і у відповідності з діючими силами, встановлюються його нове положення. Обчислення проводиться до тих пір, поки не стабілізуються положення всіх магнітних моментів.

Розроблена комп'ютерна модель дає можливість вивчати мікромагнітний розподіл на поверхні одношарової тонкої плівки в процесі перемагнічування, а також спостерігати її доменну структуру, та залежність намагніченості від прикладеного зовнішнього поля. Дана модель дозволяє спостерігати процес формування доменів і доменних стінок як феромагнітних так і антиферомагнітних зразків.

Віктор Корсун

*Український науково-технологічний центр (УНТЦ),
США*

ТРАНСФЕР ТЕХНОЛОГІЙ, ІННОВАЦІЇ ТА ПІДПРИЄМНИЦТВО - ЦЕ СТИМУЛЯТОРИ РОЗВИТКУ УКРАЇНСЬКОЇ НАУКИ

Сьогодні я б хотів поспілкуватися з Вами про інноваційні процеси в Україні. Так як є дуже мало золота та нафти в Україні, також є дуже мало інновацій.

В Україні є багато наукоємних досліджень та інженерної технології – А ДУЖЕ МАЛО ІННОВАЦІЇ.

ІННОВАЦІЯ – походить від науки та наукових досліджень, переходе в захищену форму технологій, а тоді, коли ці винаходи, інженерні розробки та продукти виходять на ринок і люди їх купують – **це зветься інновацією!**

Не придушуйте інтелектуальні ресурси України. Не придушуйте людський потенціал українських учених до інновацій. Чому інновації важливі – тому, що це створює нові високотехнологічні робочі місця в Україні. Давайте використовувати свої інтелектуальні ресурси для зростання в українському секторі високих технологій, створення нових робочих місць, а також для збереження молодих вчених в Україні.

Що таке конкурентноздатна країна на світовому ринку? Це країна, яка є успішною в економіці та науці, в культурі, освіті та спорті. Продуктивна країна це та країна, яка створює нові робочі місця для людей, країна, в якій відбувається прогрес, а не стагнація, країна, в якій успішно розвивається середній робочий клас, країна, яка турбується про якість життя людей.

Базові елементи національної стратегії!

Цілі та необхідні дії на наступні 5-10 років:

- Створення нових робочих місць праці;
- Ліквідація корупції;
- Стати глобально конкурентною країною;
- Зробити аграрний сектор №1 наново;
- Розробити ефективну енергосистему;
- Покращити систему охорони здоров'я;
- Зробити освіту № 1 наново;
- Розробити нову інфраструктуру та очистити та дбати про довкілля.

Чи може Україна сьогодні конкурувати у глобальній гонці економічних знань? Перекоаний, що Україна має бути на карті високотехнологічних країн. Бути чи не бути на цій карті – це для Вас вже не питання. Ви мусите бути! Чим довше Ви чекаєте, тим стає складніше!

Діяльність офісів з трансферу технологій в університетах США:

- Патентування
- Ліцензування
- Маркетинг
- Старт-ап компанії

В США організації з трансферу технологій існують при університетах, в національних лабораторіях та приватних компаніях. Трансфер технологій у США – один з найважливіших інструментів, який створює нові робочі місця!

Що таке процес комерціалізації? Ми всі знаємо, що таке комерціалізація! Але чи знаємо ми насправді, що є процесом комерціалізації? Це - чорний ящик! Але цей процес працює успішно якщо Ви націлені на вдачу!

Є Українці, які націлені на вдачу: І.І. Мечніков, Waldemar Haffkine – ”Людина, яка вбила штам чуми”, Моріс Подолоф родом з Кіровограду та Едді Готліб з Києва, які заснували найвідомішу та найуспішнішу баскетбольну лігу - NBA – Національна баскетбольна асоціація в США, Андрій Курков - популярний український письменник у 65 країнах світу, українські художники в 1930-х, які були в авангарді сучасного мистецтва – Олександр Архипенко, Софія Левітська, Олексій Грищенко та інші.

В чому цінність старт-ап компанії? Це потік інвестицій в Україну, поява нових якісних товарів на ринку України, швидке поширення достатку, успішний розвиток середнього класу та створення нових робочих місць, які потрібні Україні сьогодні!

Що дає університетам та інститутам у США право робити ліцензування та старт-ап компанії? Як це відбулося в США? Це відбулося практично за одну ніч, коли в США побачили, що вони не спроможні конкурувати з Японією у 1970-х роках!

Закон Бея і Доуля (Bayh Dole Act) в США набув чинності 12 грудня 1980 року. Цей закон створив єдину патентну політику для багатьох федеральних агентств, які фінансують дослідження та дозволив малому бізнесу та неприбутковим організаціям, включаючи університети, зберігати право на винаходи, зроблені в рамках дослідницьких програм з фінансуванням на федеральному рівні. Особливо закон Бея і Доуля допоміг заохочувати університети до участі в

діяльності з трансферу технологій. Закон дозволяє тисячам науковцям створювати старт-ап компанії, дозволяє інститутам та університетам заробити додаткові гроші та дає їм стимул бути більш творчими і продуктивними на ринку.

Покажіть світу, що Вони можуть знайти в Україні!

Пам'ятайте, що конкуренція – це добре! Конкуренція це стимул до росту! Конкуренція спонукає творчість! Це значить, що Вам необхідно докладно знати Ваших конкурентів!

Я знаю одне: українці надзвичайно творчі, але Ваша творчість має бути продуктивною. Наближуйтесь до своїх конкурентів замість того, щоб боятися їх.

Ваш власний інтелект - це безмежний натуральний ресурс для майбутнього України!

Навіщо університетам та інститутам рости? Їм потрібні: покращення та модернізація наукових навичок, міжнародна співпраця, конкурування у глобальній економіці знань, створення високотехнологічних робочих місць, утримання та залучення молодих науковців, становлення самодостатності інститутів та університетів, встановлення наново високого рівня української науки!

Як університет або інститут може розвиватися?

А-В-С Модель росту інституту

- A. Будуйте науковий фундамент, вживаючи бюджетне фінансування;
- B. Знаходьте додаткове фінансування при міжнародних урядових та індустріальних компаніях для розвитку Вашого інституту
- C. Створюйте власні компанії.

Відходьте від грантової культури та приєднуйтеся до конкурентного ринкового середовища! Годі розмовляти. Працюйте продуктивно!

Дозвольте українським науковцям конкурувати за фінансування від Українського Уряду на основі об'єктивних критерій, а не на базі кого знають!

Вже час здійснювати трансфер українських технологій на міжнародну арену!

Як Україна може стати конкурентоспроможною на світовому ринку? Коли Ви думаєте про науку, я хочу, щоб Ви думали про робочі місця! Україна може стати конкурентоспроможною через створення високотехнологічних робочих

місць та трансфер технологій. Я вірю, що краще майбутнє для України можливе і Україна може стати конкурентоспроможною на світовому ринку!

Просувайте себе! Ніхто не зробить це за Вас! Якщо не зараз, то коли? Якщо не Ви, то хто?

Розробіть стратегію:

- Місію;
- Бачення;
- Набір цілей;
- Дії.

“Робота продовжується, справа триває, надія продовжує жити, і мрія ніколи не загине.” – Едвард Кеннеді.

“Інвестиції в знання завжди дають найбільший прибуток” - Бенджамін Франклін

Богдан Котлярчук

*Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.Підстригача НАН України,
Український науково-технологічний центр (УНТЦ),
м. Львів, Україна*

УКРАЇНСЬКИЙ НАУКОВО-ТЕХНОЛОГІЧНИЙ ЦЕНТР: ЦІЛІ, ПРОГРАМИ ТА ПРІОРИТЕТИ ДІЯЛЬНОСТІ

1. Мета створення, фундатори і статус УНТЦ:

- **УНТЦ** – міжурядова некомерційна організація зі статусом дипломатичної місії, акредитована при МЗС України;
- **УНТЦ був створений 25 жовтня 1993 року** (підписана міжурядова угода і затверджений Статут), а з 1995 року почав фінансувати наукові проекти;
- **Метою створення і діяльності УНТЦ є** запобігання розповсюдженню наукових знань і технологій військового характеру після розвалу СРСР, сприяння у переорієнтації науково-дослідних установ колишнього Радянського Союзу на мирні цілі та їх подальшому самодостатньому розвитку шляхом грантової підтримки науковців та інженерів і залучення їх до світового наукового співтовариства;
- **Фундаторами УНТЦ є** США, Канада, Швеція (заміщена Європейським Союзом у 1998 р.) та Україна. Пізніше до міжурядової угоди про створення УНТЦ долучились Грузія, Узбекистан, Азербайджан та Молдова. Узбекистан вийшов зі складу держав-реципієнтів УНТЦ у 2009 р.;
- **За час існування УНТЦ було проведено 34 конкурси** наукових проектів, на яких підтримано **1620 проектів**. Загальна сума фінансування проектів з боку УНТЦ за весь час його діяльності складає **235 млн. дол. США**.

2. Науково-технічні сфери проектів УНТЦ:

- Ядерна енергія та ядерна безпека;
- Альтернативні та відновлювані джерела енергії;
- Екологія та моніторинг довколишнього середовища;
- Авіа-космічні технології та аеронавтика;
- Біотехнології і генна інженерія та їх застосування;
- Біобезпека та біозахист людини і довкілля;
- Наноматеріали і нанотехнології та їх застосування у функціональній електроніці, джерелах енергії і медицині;
- Нові комп'ютерні та комунікаційні технології і системи;
- Вірусологія та епідеміологія: моніторинг і запобігання розповсюдження небезпечних захворювань;
- Фізичне матеріалознавство і нові конструкційні матеріали;
- Нові методи неруйнівного контролю матеріалів і конструкцій;

- Математичне моделювання процесів і явищ в різних сферах людської діяльності та довколишнього середовища.

3. Основні програми і напрямки діяльності УНТЦ:

- Програма регулярних проектів (завершилась у 2012 р.);
- Програма науково-комерційних проектів (державне та приватне комерційне партнерство у сфері наукоємких технологій та матеріалів);
- Програма цільових ініціатив (фінансування наукових проектів з пріоритетних напрямків сумісно з країнами-реципієнтами УНТЦ);
- Програма цільових досліджень з глобальних напрямків;
- Програма підтримки патентування за результатами діючих проектів УНТЦ;
- Програма грантової підтримки вчених для участі в міжнародних наукових конференціях, виставках та зустрічах із зарубіжними партнерами;
- Програма проведення контактних семінарів і конференцій в країнах-реципієнтах УНТЦ з питань пошуку комерційних партнерів та налагодження співпраці з ними;
- Навчання персоналу і методична допомога в сфері трансферу технологій та планування самодостатнього розвитку наукових колективів (програма STCO);
- Цільові навчальні семінари, круглі столи і практикуми для науковців та інженерів з питань підготовки успішних проектних пропозицій;
- Співпраця з іншими державними і недержавними науковими фундаціями (FP7, GIPP, NSF, NASA, CRDF, та ін.), та їх адміністративна підтримка.

4. Інноваційні пріоритети програм УНТЦ:

- Практична спрямованість та комерційна привабливість розробок, як критерій оцінки та відбору проектів УНТЦ;
- Новизна наукових підходів та переваги пропонованої розробки над існуючими аналогами, як необхідна вимога до проектних пропозицій і участі в конкурсі проектів УНТЦ;
- Відповідність пропонованої розробки до пріоритетних напрямків розвитку науки і народного господарства країн-реципієнтів (зокрема, для проектів програми цільових досліджень УНТЦ-НАН України);
- Планування самодостатнього розвитку творчого колективу на стадії підготовки проектної пропозиції та звітування по проектах УНТЦ;
- Пріоритетність цільових та комерційних партнерських проектів;
- Фінансова і методична підтримка з питань патентування та захисту інтелектуальної власності виконавців проектів УНТЦ.

(Див. більше про УНТЦ на веб-сторінці: www.stcu.int)

Роман Дзумедзей

*Відділ з питань інтелектуальної власності Прикарпатського національного університету
імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

ЗАХИСТ ПРАВ ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ ВЛАСНОСТІ У МІЖНАРОДНИХ ДОСЛІДНИЦЬКИХ ПРОЕКТАХ

Інтелектуальна власність сьогодні відіграє ключову роль у всіх сферах суспільного життя. У зв'язку зі створенням і використанням об'єктів права інтелектуальної власності неминуче виникають відносини правового характеру. Для стимулювання розвитку продуктивних сил, науки, техніки, мистецтва, освіти людство на відповідному етапі свого розвитку винайшло такі речі, як патент на винахід, корисну модель, промисловий зразок, свідоцтво на товарний знак, знак обслуговування тощо.

Світова економіка вийшла на такий етап, коли на перший план виходять нематеріальні активи, основу яких складають нові знання, ідеї. Кожна компанія, яка успішно витримує конкуренцію має у своїй структурі спеціальні підрозділи, які займаються дослідженнями або інтенсивно співпрацює із дослідними центрами, основу яких складають університети, як генератори найновіших знань. Університети, у свою чергу, створюють на своїй базі структури, які безпосередньо займаються впровадженням їхніх досягнень – наукові та технологічні парки, бізнес-інкубатори. Дослідники з України мають не менш вагомий науковий потенціал та отримують результати, які відповідають світовому рівню або й перевищують його.

Однак, зважаючи на високотехнологічні сучасні результати, практично жоден університет не може самостійно організувати повний цикл наукових досліджень, включаючи шлях від ідеї до отримання кінцевого продукту. Найбільшою перепорою на цьому етапі є дороге технологічне та діагностичне обладнання. Тому поширеною стала тенденція щодо організації наукових консорціумів різних організацій, у тому числі з малого і середнього бізнесу, кожна із яких виконує певну частину досліджень, а результатом є створення принципово нового продукту та його виробництво. Та на цьому етапі виникає питання про визначення частки кожної організації у створенні такого продукту, зокрема, щодо отримання прибутку від його реалізації. Такі питання потребують професійного юридичного обґрунтування з урахуванням законів кожної держави, угоди між виконавцями такої дослідницької роботи (Угоди консорціуму), різних міжнародних актів, які регулюють взаємовідносини між учасниками.

Україна на сьогоднішній день має належну правову базу для охорони інтелектуальної власності з урахуванням світового досвіду. Однак, у зв'язку із появою нових викликів все більше розширюються можливості практичного використання нових ідей та технологій. При цьому актуальними стають питання, пов'язані із умінням розпоряджатися майновими правами на свої розробки, передачею технологій, патентуванням в інших державах.

УДК 658

Григорій Химич

*Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя
м. Тернопіль, Україна*

НАУКОВІ ПАРКИ - МЕХАНІЗМИ ВПРОВАДЖЕННЯ ІННОВАЦІЙ У ВИРОБНИЦТВО

Згідно з міжнародними стандартами, інновація визначається як кінцевий результат інноваційної діяльності, що втілений у вигляді нового чи вдосконаленого продукту, впровадженого на ринку, або вдосконаленого технологічного процесу, що застосовується у практичній діяльності, або в новому підході до соціальних послуг.

Інноваційний кластер – цілісна система вищих навчальних закладів, наукових організацій та спеціалізованих підприємств за напрямками виробництва готового інноваційного продукту, що включає в себе весь інноваційний ланцюжок від розвитку фундаментальної наукової ідеї до виробництва і дистрибуції готової продукції.

Інноваційний кластер формує строго орієнтовану систему поширення нових знань, технологій і інновацій.

Найбільш успішні інноваційні кластери формуються там, де здійснюється або очікується прорив в області техніки і технології виробництва з наступним виходом на нові ринки.

Основним принципом формування інноваційного кластера є вибір пріоритетних напрямків науково-технічного й технологічного розвитку економіки регіону з відповідним науковим інноваційним потенціалом, який у змозі виконувати рішення поставлених завдань.

У світі успішно працюють понад чотири тисячі технологічних, наукових парків і технополісів. Чверть таких інноваційних середовищ виникла протягом 1990—1999 років, половина — після 2000-го.

Серед пріоритетних напрямків діяльності:

АР та АТ технології	26 %
біотехнології	25 %
електроніка	19 %
сільське господарство	9 %
екологія	8 %
нові матеріали	6 %
хімія	5 %

Аналізуючи вищеприведене, можна констатувати, у якому напрямі розвиваються міжнародні ринки.

Україна взяла курс на інноваційний розвиток, що обумовлює посилення відповідальності регіонів за стан та розвиток інноваційного потенціалу і залучення його до вирішення регіональних соціально - економічних проблем. Але за останні 15 років галузева наука, яка була при відповідних міністерствах, відомствах та підприємствах, практично перестала існувати. Провідні

підприємства, котрі раніше підпорядковувалися міністерствам, частково (до 70%) втратили свій виробничий потенціал, а відповідно й науково-технічний (70 – 100)%. На теперішній час ситуація складається таким чином, що найвагоміші наукові та науково-технічні ресурси регіонів сконцентровані у вищих навчальних закладах.

У наукових підрозділах вищих навчальних закладах зосереджений основний науковий потенціал фундаментального та прикладного рівнів і багато наукових напрацювань за різними галузями народного господарства. Один із шляхів втілення цього наукового здобутку у реальну високотехнологічну продукцію – це створення наукових парків.

Наукові парки – форма інтеграції науки з промисловістю – відносяться до розряду територіальних науково-промислових комплексів, які на основі міжнародної інтеграції набули і міжнародного статусу.

У розвитку "наукових парків" чітко простежуються два етапи: 60-і роки, коли виникло більшість "наукових парків" на їх "батьківщині" - в США - і з'явилися зародкові їх форми в західноєвропейських країнах - Великобританії, Франції, ФРН. У 80-і роки, з початку яких стало формуватися "другого покоління" технопарків у США і Західній Європі, з'явилися технопарки і в країнах, де їх раніше не було (Японії та інших країнах Далекого Сходу), різноманіття "парків" поповнилося новими їх різновидами .

"Наукові парки" можна умовно звести до трьох моделей - американської (США, Великобританія), японської (Японія) та змішаною (Франція, ФРН).

Формування наукових парків України не мають чітко вираженої однієї із трьох моделей, а мають модифіковану структуру з залученням державноуправлінських структур та зарубіжних підприємств, які орієнтовані на напрями діяльності створеного наукового парку.

Основними функціями наукового парку є:

- створення нових видів інноваційного продукту, здійснення заходів щодо їх комерціалізації, організація та забезпечення виробництва наукоємної, конкурентоспроможної на внутрішніх і зовнішніх ринках;
- розвиток міжнародного і вітчизняного співробітництва у сфері науково-технічної та інноваційної діяльності;
- сприяння залученню іноземних інвестицій.

На сьогоднішній час в Україні зареєстровано 16 технологічних парків (функціонує 8), 1 міжнародний Китайсько-Український технопарк та 4 наукові парки. Задекларовано про створення і підготовлені пакети документів та програми розвитку понад 10, таблиця, станом на 1 вересня 2012 року.

№ п/п	Назва наукового парку	Напрями діяльності	Примітки
1.	Науковий парк "Київська політехніка"	- системи енерго- та ресурсозбереження на основі відновлюваних і нетрадиційних джерел енергії; - системи життєзабезпечення великих міст	Засн. 2007р.

		та регіонів; - біотехнічні системи і технології; - системи спеціального та подвійного призначення	
2.	Науковий парк «Інноваційно – інвестиційний кластер Тернопілля»	- енергозбереження на основі відновлюваних і нетрадиційних джерел енергії; - інформаційні технології; - екологічний моніторинг - неруйнівні методи визначення старіння матеріалів та продовження терміну експлуатації	Засн. жовтень 2011р
3.	Науковий парк «Білоцерківський національний аграрний університет»	- ресурсо- та енергозберігаючі технології в с/г та агропромислових комплексах - новітні біотехнології, діагностика і методів лікування тварин, біобезпека. - фізико-хімічні, біохімічні та біофізичні системи контролю якості та безпеки тваринницької продукції. - виробництво, обладнання і технологічні процеси переробки та утилізації відходів агропром. виробництва та житлових комплексів. - екологічно чисті альтернативні джерела енергії і види палива	Подані документи до Мін. аграрної політики
4.	Науковий парк «Київський університет імені Тараса Шевченка»	- геохімія; - мікробіологія; - радіологічна хімія; - харчові технології - енергоефективність та енергозбереження, - екологія (розробка автоматичної системи моніторингу витрачення електроенергії, теплової енергії та води в ЖКГ, очищення питної води, налагодження виробництва вітчизняних теплових насосів)	Засн. червень 2011р
5.	Науковий парк «Ужгородський національний університет»	- відновлювані джерела енергії; - машинобудування та приладобудування як основа високотехнологічного оновлення всіх галузей виробництва; - нанотехнології, мікроелектроніка, інформаційні технології, телекомунікації; - удосконалення хімічних технологій, нові матеріали; - розвиток біотехнологій;	Прийнято рішення про створення

		<ul style="list-style-type: none"> - високотехнологічний розвиток сільського господарства і переробної промисловості; - охорона і оздоровлення людини та навколишнього середовища; - розвиток інноваційної культури суспільства. 	
6.	Науковий парк «Київський авіаційний інститут»		Відсутні дані
7.	Науковий парк «ФЕД»	<ul style="list-style-type: none"> - авіація, верстатобудування, інноваційна мехатроніка; - нові матеріали та нанотехнології; - інформаційно-комунікаційні технології; - біотехнології, біомедицина і фармація; - ядерні технології в енергетиці та охороні здоров'я; - енергозбереження та нові технології виробництва енергії; - приладобудування; - нові технології в агропромисловому комплексі. 	Засн. листопад 2011р.
8.	Науковий парк «АгроЕко - Київ»	<ul style="list-style-type: none"> - біоенергетика і органічне землеробство. - виробництво альтернативних біопалив на основі рослинної сировини. - виробництва альтернативної «зеленої енергетики» в галузі біоконверсії та термоконверсії біопалив. - замкнені виробничих циклів в агроєкосистемах. - утилізація осаду стічних вод і твердих відходів. - еколого-безпечні технології вирощування с/г культур і лікарської сировини. - агроєкологічна оцінка агроландшафтів і систем землекористування з використанням дистанційного зондування з космосу. - розвиток сільських територій. 	На стадії створення
9.	Науковий парк «Інноваційний розвиток Поділля»	<ul style="list-style-type: none"> - енергозбереження, - нові матеріали, - зміцнення матеріалів, - автоматизовані вимірювання, - вторинна переробка побутових та промислових відходів 	На стадії створення

10.	Науковий парк «Полісся»	- альтернативна енергетика - відновлювальні джерела енергії у сільській місцевості	Засн. 2011р.
11.	Науковий парк «Полтавський національний технічний університет»		На стадії створення

Такі структури дають можливість поступово відновлювати та нарощувати втрачені позиції таких перспективних наукоємких галузей, як енергозбереження та альтернативні джерела енергії, хімія, нанотехнології, інформаційні та телекомунікаційні системи, технології утилізації та вторинної переробки побутових та промислових відходів, екологія, охорона здоров'я та ін. Розвиток таких функціональних кластерів дасть можливість підтримувати та розвивати науковий та промисловий потенціал окремих регіонів та України в цілому на високому рейтинговому рівні світового масштабу, інвестиційній привабливості.

Успішне функціонування підприємств інноваційного напрямку та розвитку нових технологій передбачає створення сприятливих умов у сфері інноваційної діяльності та трансферу технологій, а саме:

- запровадження механізмів стимулювання інноваційної діяльності підприємств малого та середнього бізнесу (тимчасове звільнення від сплати податку на прибуток і землю, звільнення від сплати податку на додану вартість при реалізації науково-дослідних та конструкторсько-технологічних робіт);
- функціонування довгострокових державних програм;
- створення пільгових умов кредитування інноваційних проектів;
- зниження ставки відрахувань до соціальних фондів з фонду оплати праці працівників наукових парків, зайнятих створенням інноваційної продукції;
- розвиток внутрішнього ринку;
- розвиток експортного потенціалу регіонів.

У цьому розділі викладені тільки ключові позиції механізмів стимулювання та розвитку інноваційних процесів регіонів та країни. Практично всіх форумах, семінарах, конференціях по інноваційному розвитку озвучуються проблеми, з якими зіштовхуються суб'єкти інноваційної діяльності. Тільки спільне вирішення цих проблем дасть можливість швидкими темпами реалізовувати інноваційні проекти та розвивати високотехнологічну виробничу інфраструктуру регіонів.

УДК 669.788

Юрій Бачинський, Павло Басистий, Сергій Мохун, Роман Іваницький

*Тернопільський національний педагогічний університет ім. В.Гнатюка,
м. Тернопіль, Україна*

ВПЛИВ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СТАНУ ВОДНЮ НА ЙОГО РОЗЧИННІСТЬ У РЕАКТОРНИХ СТАЛЯХ

Основним недоліком реакторних сталей є висока воднева проникність, що може приводити до їх водневого окрихчення у напруженому стані. Крім того, зменшення втрат водню і його ізотопів у довкілля має важливе екологічне значення, враховуючи радіоактивність тритію. Відомо, що воднева проникність матеріалів залежить від енергетичного стану розчинених іонів водню (умов екранування заряду протона електронами металу). За малого вмісту він знаходиться у протонному стані (H^+) і зі зростанням концентрації переходить у аніонний (H^-). При цьому, якщо сталь містить гідридотвірні елементи, можливе утворення виділень гідридних фаз, які є концентраторами напружень, що погіршує міцнісні властивості.

У роботі узагальнені результати дослідження розчинності водню у реакторній сталі X12Г20В з різними системами легування (табл. 1), яку розраховували за водневою проникністю і коефіцієнтом дифузії, визначеними в одному експерименті. Як слідує з отриманих результатів (табл. 2), за формування гідридів процес розчинення переходить від ендотермічного до екзотермічного і теплота розчинення водню H_s змінює свій знак, що є наслідком легування сталі X12Г20В гідридотвірним скандієм.

Таблиця 1 - Хімічний склад досліджуваних плавок сталі X12Г20В

Сталь	Fe	Cr	Mn	W	Si	Ti	C	Sc
X12Г20В (Пл.1)	Осн.	12,5	19,3	0,95	0,57	0,08	0,11	-
X12Г20В (Пл.2)	Осн.	12,9	20,7	2,03	0,13	0,10	0,28	0,10

Таблиця 2 - Параметри розчинності водню у сталі X12Г20В ($S=S_0 \exp(-H_s/RT)$)

№ плавки з табл. 1	Температурний інтервал, K	S_0 , МОЛЬ $м^3 \cdot Па^{1/2}$	H_s , кДж МОЛЬ
1	983–573	$2,4 \cdot 10^{-2}$	21,5
2	983–573	1,1	-29,6

Таким чином, вибираючи фізичну природу легуючих елементів і оптимізуючи їх вміст, необхідно враховувати, що водень, знаходячись в аніонному стані, сприяє процесу гідридоутворення в реакторних сталях, одночасно зменшуючи втрати тритію крізь реакторне обладнання і погіршуючи міцнісні характеристики.

УДК 541.55

**А.М. Коровицький¹, І.М. Колядинський¹, В.В. Сахарчук¹,
Г.Л.Мирончук²**

¹*Луцький національний технічний університет,*

²*Волинський національний університет ім. Лесі Українки,
м. Луцьк, Україна*

ОПТИМІЗАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЇ ОТРИМАННЯ СТАБІЛЬНОГО ПЛАЗМОВОГО РОЗРЯДУ У ВАКУУМНІЙ КАМЕРІ ВУП5М ПРИ МАГНЕТРОННОМУ РОЗПОРОШЕННІ

Одним з методів отримання тонких плівок є магнетронне розпорошення на постійному струмі [1]. Магнетронні системи депонування матеріалів достатньо зручні та прості у використанні, мають достатньо високу ефективність, проте, володіють рядом недоліків технологічного характеру, що дещо обмежують функціональність таких систем. Так, наприклад, було помічено, що плавність та рівномірність подачі інертного газу (наприклад, аргону Ar) у робочий об'єм суттєво впливає на генерування та стабільність плазмового розряду. А для досягнення високої якості і повторюваності фізичних властивостей депонованих матеріалів необхідно забезпечити: а) стабільність магнетронного плазмового розряду протягом визначеного часу напилення, б) керованість та повторюваність технологічних умов отримання стабільного плазмового розряду.

Основними задачами даної роботи є створення системи ефективного постачання робочого газу до вакуумної камери ВУП5М та дослідження оптимальних параметрів газового потоку задля забезпечення стабільного плазмового розряду протягом всього робочого циклу.

Дослідження проводилося за допомогою вакуумного посту ВУП5М з вдосконаленою системою подачі робочого газу. Вдосконалення система газопостачання базується на контролері газового потоку термічного типу (Mass Flow Controller, MFC) Horiba Sec-4400 [2], який забезпечує функції витратоміра та задавача потоку газу у вакуумну камеру. Газові контролери термічного типу забезпечують високу точність вимірювання потоку, що складає 1% від повної шкали.

Схема системи напуску газу для ВУП5М відображена на рис.1. На основі проведених досліджень запропонованої конструкції системи газопостачання та аналізу параметрів усіх робочих вузлів вакуумної системи ВУП-5М, було розроблено математичну модель та відповідні алгоритми керування технологічним процесом магнетронного депонування матеріалів, рис.2. Так здійснення обліку і керування вхідними параметрами (потік газу, тиск у робочій камері, напруга, струм, температура підкладки) та дослідження характеристик відповідних депонованих матеріалів (товщина плівки, рівномірність осадження, адгезія, електрофізичні, оптичні характеристики, тощо), дозволяє знайти ті оптимальні параметри технологічного процесу, які

забезпечують отримання якісних результатів та дозволяють досягнути високої повторюваності та відтворюваності характеристик осаджених плівок.

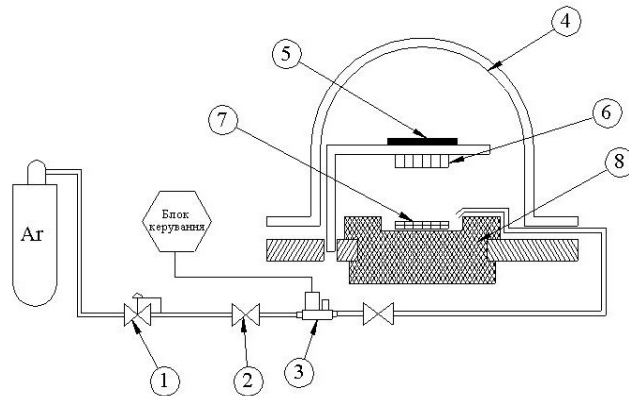


Рисунок 1 - Схема системи напуску газу:
1 – регулятор тиску; 2 – вентиль; 3 – контролер потоку газу F260; 4 – вакуумна камера;
5 – підігрів підкладки; 6 – підкладка; 7 – мішень (розпалюваний матеріал); 8 - магнетрон.

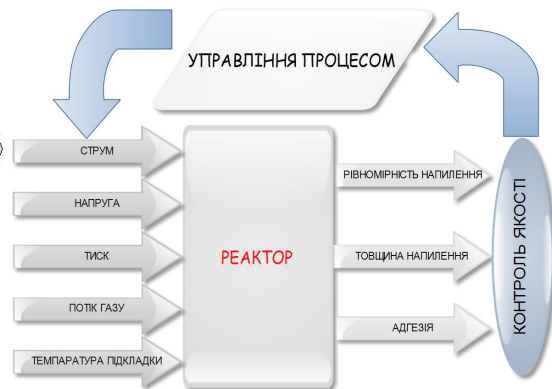


Рисунок 2 -Модель технологічного процесу магнетронного депонування матеріалів.

Для оцінки адекватності запропонованих конструктивних змін у вакуумний пост ВУП5М та математичної моделі технологічного процесу магнетронного депонування нами досліджено утворення тонких плівок PbI_2 , депонованих на скляну підкладку.

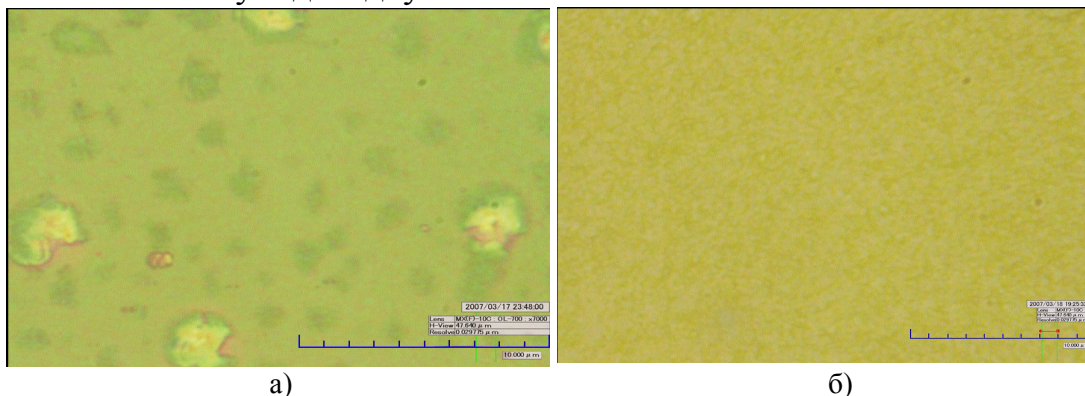
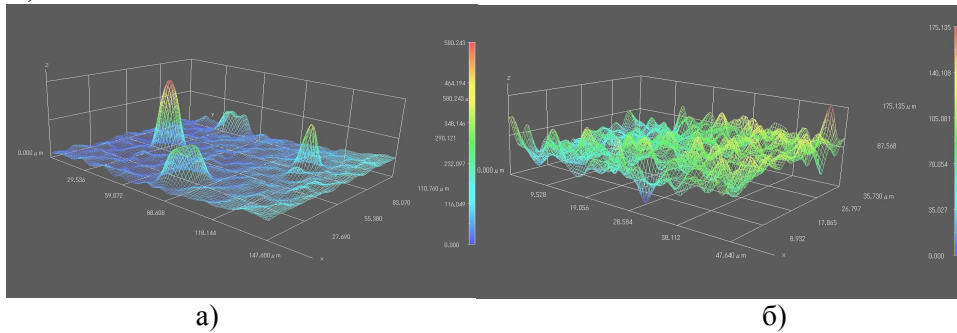


Рисунок 3 - Оптичні зображення плівок PbI_2 напилених на:
а) стандартна конфігурація системи ВУП5М
б) вдосконалена конфігурація системи ВУП5М

Проведення експериментів здійснювалося у два етапи. Перший етап проводився на стандартній конфігурації ВУП5М. При цьому спостерігалися проблеми зі стабільністю плазмового розряду. Необхідно було здійснювати повторні запалювання розряду, затухання якого було викликане не рівномірністю подачі газу до системи. Такі збурення у технологічному процесі якісно відбилися на розподілі частинок матеріалу на підкладці, про що свідчать оптичні дослідження, результати якого відображені на рис.3а. При проведенні другої серії дослідів вакуумний пост ВУП5М було оснащено описаною вище системою напуску газу. Досліди проводилися з використанням таких самих робочих характеристик, як і у першому випадку, при тиску 0.7Па та напрузі 400В. Під час роботи було виявлено: по-перше, було отримано стабільний

плазмовий розряд протягом всього часу депонування, що забезпечило гомогенність осадження матеріалу (рис.3б); по-друге, було встановлено діапазон потоку аргону, при яких забезпечувався стабільний технологічний процес і він становив від 1,78 норм.см³/хв до 7,53 норм.см³/хв.

Оптичний аналіз робився за допомогою 3Д відеомікроскопа IntScore [3]. Зображення плівок було отримане при 700х кратному оптичному збільшенні (рис.3), а також використано функцію мікроскопа - побудови 3Д поверхні плівки (рис.4).



а) б)
Рисунок 4 - 3Д поверхні плівок PbI₂ напилених на:
а) стандартна конфігурація системи ВУП5М
б) вдосконалена конфігурація системи ВУП5М

Як видно з проведених оптичних досліджень, у першому випадку було отримано не рівномірний розподіл часток PbI₂ на поверхні підкладки, рис.3а та наявність центрів локальної кристалізації йодиду свинцю, висота яких сягає 58мкм, рис.4.а.

Аналіз продуктів депонування, виконаних на вдосконаленій системі ВУП5М (рис.3б) показав більш гомогенний розподіл часток по всій поверхні підкладки. При проведенні 3Д аналізу поверхні було встановлено середню товщину плівки 7 мкм, рис.4б.

На основі проведеного експерименту було встановлено, що використання вдосконаленої системи подачі газу у вакуумну камеру дозволяє отримувати стабільну плазму протягом всього експерименту. Виявлено, що запропонована математична модель технологічного процесу магнетронного осадження дозволяє отримати оптимальні параметри процесу.

1. Б.С. Данилин, В.К. Сырчин, *Магнетронные распылительные системы* (Радио и связь, Москва, 1982), 72 с.
2. Miyoshi Kimura / – Режим доступу: <http://www.horiba.com/uploads/media/RE05-08-044-600.pdf>
3. Режим доступу: www.int-24.com

УДК 541.183

Ігор Бордун, Вадим Пташник, Марія Садова, Мар'яна Велигорська
*Національний університет "Львівська політехніка",
м. Львів, Україна*

ЗМІНА ГІДРОФОБНОСТІ АКТИВОВАНОГО ВУГІЛЛЯ В РЕЗУЛЬТАТІ ОБРОБКИ ЕЛЕКТРОХІМІЧНО АКТИВОВАНИМИ ВОДНИМИ РОЗЧИНАМИ

Активоване вугілля (АВ) широко використовується у різних галузях сучасної промисловості. Це зумовлено тим, що АВ володіє високорозвиненою пористою структурою, особливими електрофізичними властивостями та складною хімією поверхні. Зміна хімічних властивостей поверхні проводиться найчастіше з використанням високотемпературного теплового впливу чи за допомогою хімічних реагентів, в першу чергу, кислот. Такий підхід дає добрі результати, однак є енерго- та ресурсозатратним, а також супроводжується певними екологічними проблемами. У даній роботі ставилося за мету використати для зміни хімічних властивостей поверхні АВ електрохімічно активовані (ЕХА) водні розчини.

Для дослідження було використано розчини хлориду калію марки о.с.ч. у дистильованій воді з концентрацією від 0,005 до 0,1 г/л. Вибір хлориду калію для приготування досліджуваних розчинів пояснюється тим, що під час його розчинення у воді гідроліз відбувається без зсуву іонної рівноваги води. ЕХА отриманого розчину проводилась в непротічному електролізері з інертними електродами. Напруга між електродами становила 250 В, час обробки – від 30 с до 600 с. У якості досліджуваного АВ використано попередньо подрібнене вугілля марки БАУ з розміром частинок 45-63 мкм. Отримане вугілля було витримано 6-24 годин у ЕХА розчині, відфільтровано та висушено при 120 °С.

Дослідження гідрофільних та гідрофобних властивостей проводилося згідно методики [1]. Встановлено, що сумарна пористість досліджуваного АВ за об'ємом не змінилася, тобто є однаковою як для вихідного, так і для обробленого вугілля. Максимальні зміни гідрофільних властивостей зафіксовані у АВ, витриманому 12 год у католіті, одержаному з розчину концентрацією 0,1 г/л при тривалості активації 50 с. У вихідному вугіллі гідрофільні пори становлять 44-46%, гідрофобні – 54-56 % доступного для молекул простору пор. Після вказаної обробки величина гідрофільних пор склала 92-94 %, а гідрофобних - 6-8%. Оскільки гідрофільність АВ напряму пов'язана з наявністю кисневмісних поверхневих груп, вважаємо, що католіт ЕХА розчину спричиняє окислення поверхні оброблюваного вугілля.

Таким чином, показано, що ЕХА водні розчини можна використовувати для зміни поверхневих хімічних груп АВ, і, відповідно, отримувати вугілля зі зміненими адсорбційними та іонообмінними властивостями.

1. А.П. Баранов, Г.В. Штейнберг, В.С. Багоцкий, *Электрохимия* 7, 387 (1971).

УДК 621.9.048.7

О.М. Шаблій, Ч.В. Пулька, В.С. Сенчишин, В.Я. Гаврилюк, М.С. Базар
*Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,
м. Тернопіль, Україна*

ВИКОРИСТАННЯ ЛАЗЕРНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ ДЛЯ ЗМІЦНЕННЯ ДЕТАЛЕЙ МАШИН

З появою потужних газових лазерів, які забезпечують в режимі неперервної генерації потужність в декілька кіловат, суттєво розширилась область застосування лазерного випромінювання для зміни властивостей поверхневих шарів матеріалів. Цей вид оброблення доцільно використовувати тільки в тих випадках, коли застосування звичайних методів поверхневого зміцнення (наприклад, індукційне гартування) пов'язане з відповідними труднощами або взагалі неможливе. Така рекомендація приведена тому, що для забезпечення необхідної продуктивності лазерного зміцнення, порівняно з продуктивністю індукційного оброблення, необхідне потужніше лазерне устаткування, а при збільшенні його потужності більше 5–8 кВт спостерігається різке зростання капіталовкладень [1]. Тому, наприклад, при обробленні деталей нескладної геометрії собівартість зміцнення лазером потужністю 10 кВт приблизно рівна подвійній собівартості оброблення звичайними методами [1].

В останній час для зміцнення почали використовувати електроннопроменеві установки. Собівартість електроннопроменевого і лазерного способів зміцнення із застосуванням лазерів потужністю до 5 кВт однакова [2], але лазерний промінь в порівнянні з електронним має ряд переваг: не потрібно створювати вакуум в зоні оброблення і тому випромінювання можна передавати на великі відстані; не викривлюється магнітними полями; може передаватись за допомогою простих оптичних систем; не являється джерелом рентгенівського випромінювання.

Відомо, що зміну властивостей поверхневих шарів матеріалів за допомогою лазерного випромінювання можна отримати в результаті швидкісного термічного циклу, або за допомогою насичення поверхні легуючими елементами (Cr, Al, W, C). Ці елементи, розчинившись в основному металі утворюють новий шар з особливими властивостями.

Для того, щоб використовувати неперервне лазерне випромінювання з метою зміцнення відповідних деталей необхідно вирішити ряд технологічних завдань: вибрати умови розміщення оброблюваної поверхні відносно фокусу фокусованої лінзи, вивчити процеси оброблення нахилених поверхонь і підготовлення поверхні до оброблення.

На характер формування зміцненого шару великий вплив має рівномірність розподілу енергії в лазерному промені, тому оброблення дефокусуєчим променем не завжди доцільне, так як нерівномірність розподілу енергії в розфокусованому промені набагато вища, чим у сфокусованому. У випадку розміщення робочої поверхні у фокальній площині при одночасному

високочастотному скануванні лазерного променя можна легко контролювати ширину і довжину фокальної плями, а також і розподіл потужності. Одним із прикладів сканування лазерного променя можна назвати механічну вібрацію дзеркала із частотою 1–2 кГц.

Для збільшення ефективності лазерного зміцнення деталей на оброблювані поверхні наносять спеціальні покриття, які добре поглинають енергію випромінювання з даної довжини хвилі. Поглинання залишається достатньо високим навіть у випадку, коли кут опромінення поверхні досягає 45°.

Твердість зміцненого шару і його розміри залежать від матеріалу, потужності променя і його діаметра, а також від швидкості оброблення. Контролюючи ці параметри в процесі виробництва і змінюючи їх, можна здійснювати відповідні технологічні процеси зміцнення деталей машин.

1. В.С. Коваленко, Л.Ф. Головка, Г.В. Меркулов, А.И. Стрижак, *Упрочнение деталей лучом лазера* (Техніка, Київ, 1981), 131 с.
2. F.D. Seamen, E.V. Locke, Soc. Auto. Eng. **N440864**, 1974.

УДК 669.018.25

Валерій Лазарюк

*Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,
м. Тернопіль, Україна*

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТАЛОКЕРАМІЧНИХ ТВЕРДИХ СПЛАВІВ ДЛЯ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНИХ ТВЕРДООКСИДНИХ ПАЛИВНИХ КОМІРОК

Металокерамічні тверді сплави на основі карбідів вольфраму, титану, хрому володіють унікальним поєднанням ряду важливих механічних, фізичних та хімічних властивостей, що дозволяє використати їх як матеріали для деяких деталей твердооксидних паливних комірок. Високі робочі температури та агресивне середовище ускладнюють вибір металокерамічних матеріалів для виготовлення бар'єрних струмопроводів (інтерконнекторів) паливних комірок, які експлуатуються одночасно в середовищі палива та окислювача.

Серед найбільш поширених матеріалів струмопроводів використовуються оксидна кераміка на основі хроміту лантану LaCrO_3 , сталі та сплави з високим вмістом хрому та добавками марганцю та іттрію. Проте недоліками кераміки на основі LaCrO_3 є, крім високої вартості, значна залежність її електропровідності від парціального тиску кисню та випаровування хрому при високих температурах, а недоліками сталей є обмеження їх експлуатаційних властивостей при температурах вище 800°C .

Дослідження електрофізичних та корозійних властивостей твердих сплавів на основі карбідів титану, вольфраму, хрому, ванадію, ніобію, танталу показують перспективність їх використання для виготовлення твердооксидних паливних комірок. До переваг даних матеріалів можна віднести їх високу жаростійкість та електропровідність, низьку об'ємну пористість, високу теплопровідність (>10 Вт/м К), необхідний коефіцієнт термічного розширення ($9-11 \cdot 10^{-6} / ^\circ\text{C}$). Проте важливою характеристикою роботи паливної комірки є висока стабільність електрофізичних властивостей при тривалій експлуатації при високих температурах, яка погіршується при наявності летучих компонентів продуктів окислення. Тому одним із перспективних матеріалів для виготовлення струмопроводів є тверді сплави на основі карбіду титану леговані карбідами хрому, ніобію та танталу.

Дослідження окислення твердих сплавів на основі карбідів титану та ніобію показали їх високу стійкість до руйнування при високих температурах. Це пояснюється утворенням щільної окалини із декількома дифузійними бар'єрними шарами як для проникнення кисню до основи, так і для випаровування компонентів сплаву. Враховуючи необхідність забезпечення високої електропровідності та жаростійкості можна рекомендувати для використання, як матеріалів струмопроводів паливних комірок, сплави, що вміщують 24-30 % металічної зв'язки (на основі нікелю, молібдену, кобальту або хрому). Експериментально встановлено, що при окисленні сплаву TiC-NbC-Ni-Cr із вмістом Ni-Cr зв'язки 24 % (мас.), приріст його маси склав $2,97 \cdot 10^{-2}$ кг/м² при

температурі 1000 °С за шість годин. Вимірювання коефіцієнту термічного розширення даного сплаву при температурах 200 - 1000 °С виявило значення $10-12 \cdot 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$, що є близьким до значень основних матеріалів твердооксидних паливних комірок.

Властивості металокерамічних твердих сплавів на основі карбіду титану дозволяють рекомендувати дані матеріали для виготовлення конструкційних деталей паливних комірок, проте необхідним є проведення досліджень корозійних та електрофізичних властивостей в експлуатаційних середовищах палива та окислювача.

УДК 53.05, 617.735

Роман Ткачук, Богдан Яворський

*Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,
м. Тернопіль, Україна*

КОНТРОЛЬ ЕНЕРГІЇ ТЕСТОВОГО ПОДРАЗНЕННЯ ПРИ КВАНТОВІЙ РЕТИНОГРАФІЇ

Застосування тестового подразнення сітківки ока експозицією світлом інтенсивністю I значно нижчою за стандартну (квантовою інтенсивністю) забезпечує кращу роздільну здатність електроретиносигналу (ЕРС), менший рівень інвазивності подразнення та більшу швидкодію ретинографічного дослідження [1-4]. Оскільки світлова хвиля U (електромагнітне випромінювання, ЕМВ) поширюється від джерела світла (ДС) через середовища ока (рогівки, передню камеру, кришталік, скловидне тіло), то за такої інтенсивності прояви дифракції, значне зменшення відношення енергії ЕРС до енергії шумів відбору його та іншого походження спричиняють необхідність контролю величини енергії $|U|^2$ світла на сітківці ока для виявлення наявності ЕРС у відібраній суміші його з шумами та доцільності оптимальної обробки цієї суміші, порівняння нових результатів ретинографії з результатами стандартними тощо.

При розробленні методу контролю величини енергії світла, яке попадає на сітківку при наднизькій інтенсивності тестового подразнення, поширення хвилі від ДС на основі принципу Гюйгенса-Френеля представлено інтерференцією хвиль від вторинних джерел — розв'язком феноменологічного хвильового рівняння (інтегралом Кірхгофа) як результат дифракції монохроматичної хвилі з частотою $\omega = 2\pi c/\lambda$ при поширенні її через зіницю з радіусом a на сітківці ока (на відстані r). На основі застосування теореми Гріна отримано вираз напруженості електричної складової поля в точці з координатою r

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{i}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \left([\vec{k}, [\vec{n}, \vec{E}_0]] - k\vec{E}_0 \right) \oint e^{-i(\vec{k}\vec{r}')} dS' = -\frac{i}{2\pi} \frac{\omega}{c} \vec{E}_0 \frac{e^{ikr}}{r} \oint e^{-i(\vec{k}\vec{r}')} dS', \quad (1)$$

де $\vec{k} = k\vec{r}/r$ — хвильовий вектор, \vec{E} — напруженість електричного поля, \vec{E}_0 — напруженість електричного поля ДС, S' — поверхня сітківки ока, $[\vec{n}, \vec{E}_0]$ — тангенціальна складова вектора \vec{E}_0 . З урахуванням граничних умов формула (1) набула вигляду

$$\vec{E} = -\frac{i}{2\pi} \frac{\omega}{c} \vec{E}_0 a^2 \frac{J_1(ak \sin \theta) e^{ikr}}{ak \sin \theta}, \quad (2)$$

де J_1 — функція Бесселя, $\left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^m \{ x^{n+1} J_n(x) \} = x^{(n-m)+1} J_{n-m}(x)$.

Функцію U визначено методом ейконалу. Поле вважалось суперпозицією монохроматичних полів осциляторів Герца і припущено, що кут, під якими опромінюється зіниця ока, є малим (джерело ЕМВ вважалось диполем з моментом із залежними від часу величиною й орієнтацією). Представлення через інтеграл Фур'є формули (2) набула вигляду

$$\vec{E}_\omega = \text{Re} \left\{ \frac{\omega^2}{c^2 r} |q(\omega)| \vec{r}_0 (\vec{\rho}_0(\omega) \vec{r}_0) e^{i[\delta(\omega) - \omega(t-r/c)]} \right\}, \quad (3)$$

де $\vec{r}_0, \vec{\rho}_0(\omega)$ —одиничні радіальний та осьовий вектори.

Із використанням формули Кірхгофа інтегруванням (3) визначено інтенсивність кожної компоненти векторів \vec{H}, \vec{E} в декартовій системі координат усередненням по часу вектора Пойтінга методом Борна-Йордана. В результаті отримано лінійне наближення залежності інтенсивності тестового подразнення сітківки ока від параметрів поля ДС

$$I(X, Y, Z) = C |U_{\omega_0}(X, Y, Z)|^2, \quad (4)$$

де постійну C у подальшому визначено через технічні характеристики ДС та геометричні й біофізичні параметри ока.

Джерелом світла використано світлодіод, який живиться послідовністю імпульсів струму шпаруватості $D = t_p/T$, де T — період повторення імпульсів, t_p — їх ширина [5]. Цим отримано зменшення в D разів значення середнього струму через діод. Для врахування інерційності ока $T \leq 40$ мсек; тривалість пачки імпульсів визначає час експозиції (до 5 мсек в стандартній ретинографії). Величина струму від джерела струму рівна паспортному значенню прямого струму I_F світлодіода.

Енергія E_ϕ фотона світла, яке випромінює світлодіод, пов'язана з енергією E_z забороненої зони напругою U_n порогу забороненої зони: $E_\phi = E_z = eU_n$, де e — заряд електрона зі струму I_F/D через світлодіод. Енергія кожного фотона $E_\phi = hf_\phi$, де $f_\phi = c/\lambda_\phi$, визначається кожним електронем і складає енергію E_c світла яке випромінює світлодіод. Таким чином, кількість фотонів $n = E_c/E_\phi$. Енергія E_c світла що випромінюється залежить також від оптичної ефективності світлодіода η_d [Лм/Вт], інтенсивності (сили) світла I_v [Кд] групи данного типу світлодіодів, спектральної характеристики і діаграми спрямованості випромінювання, а також віддалі до поверхні ока і часу експозиції. Кількість фотонів визначалася за формулою

$$n = E_c \lambda_\phi / hc. \quad (5)$$

З врахуванням спектральної характеристики світлодіода сила світла

$$I_v = 683 \int_0^\infty \bar{y}(\lambda) I(\lambda) d\lambda, \quad \text{де } I_v - \text{інтенсивність (сила) світла в канделах (Кд), } I(\lambda) —$$

спектральна інтенсивність випромінювання у ватах на стерadian (Вт/ср), $\bar{y}(\lambda)$ — стандартна функція спектральної чутливості ока. При врахуванні діаграми спрямованості

$$E_c = 683 \left[\frac{I_v}{I_{v,ma}} \right] \int_{\Theta} I_{v,ma}(\theta) d\theta, \quad (6)$$

де Θ — апертура, а в квадратних дужках — паспортне значення відношення значення інтенсивності до інтенсивності при заданому струмі. Для малої апертури, монохроматичного світла формула для визначення кількості фотонів

$$\tilde{n} = 683 \frac{1}{L} \left[\frac{I_v}{I_{v,ma}} \right] I_{v,ma} t_e \frac{\lambda_\phi}{hc}, \quad (7)$$

де t_e — час експозиції, L — віддаль до ока, $l=2a$ — діаметр зіниці ока, (1-5) мм.

Отримані вирази та використані припущення разом з відомими стандартними результатами електроретинографії покладено в основу методу контролю величини енергії світла на сітківці ока при тестовому подразненні сітківки з наднизькою інтенсивністю його. Отримано змогу пониження інтенсивності світлодіодного випромінювання на порядок нижче від стандартної мінімальної інтенсивності (до $0.003 \text{ Кд} \cong \text{сек/м}^2$) та змогу оцінювання ЕРС. Подальше зменшення інтенсивності викликало утруднення через відсутність світлодіодів широкого вжитку з достатньо малими нормованими інтенсивностями.

Дослідження виконано за планом фундаментальних НДР, номер дежреєстрації 0111U002593.

1. Р. Ткачук, Б. Яворський, Вісник Тернопільського державного технічного університету **3**, 102 (2009).
2. M.F. Marmor *et al*, Doc Ophtalmol **118**, 69 (2009).
3. S. Hecht *et al*, Journal of General Physiology July 20 P. 819-840 (1942).
4. Detection of weak optical signals by human visual system http://home.etu.unige.ch/~alvarra0/Roberto_ALVAREZs_Personal_Page/About_Me_files/Eye_project.pdf.
5. Р.А. Ткачук, Б.И. Яворский, in: *20th Int. Crimean Conference “Microwave&Telecommunication Technology”* CriMiCo’2010 (Sevastopol, Crimea, Ukraine, 2010), 1127.

УДК 670.191.33

Павло Марущак¹, Ігор Коноваленко¹, Сергій Панін², Михайло Журавков³

¹*Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,
Україна*

²*Інститут фізики міцності і матеріалознавства СВ РАН,
Росія*

³*Білоруський державний університет,
Білорусь*

АНАЛІЗ ДЕФОРМУВАННЯ МАТЕРІАЛУ З МНОЖИННИМИ ТРИЩИНАМИ ТЕРМОМЕХАНІЧНОЇ ВТОМИ ЯК РОЗЛОМНО- БЛОКОВОГО СЕРЕДОВИЩА

Поверхня та приповерхневі шари конструкції відіграють визначальну роль у накопиченні пошкоджень, тому їх можна розглядати, як окрему структурну підсистему, яка відповідає за формування концентраторів та процеси релаксації напружень [1]. Дослідження закономірностей розвитку структурної деградації та розтріскування поверхневих шарів дозволяє розробити підходи діагностування технічного стану конструкції та інженерні заходи зменшення інтенсивності розтріскування. При цьому слід враховувати структурну неоднорідність матеріалу зумовлює утворення локальних ділянок концентрації напружень, а релаксація цих концентраторів за механізмами пластичного деформування спричиняє його структурну перебудову та перехід деформування на вищий структурний рівень [2].

У даній роботі досліджено фізичні передумови зміни тримкої здатності матеріалу з множинними дефектами за умов квазістатичного деформування.

В роботі досліджували призматичні темплети вирізані з поверхні експлуатованого ролика машини безперервного лиття заготовок (МБЛЗ), шириною $b = 40$ мм та товщиною $t = 10$ мм; висота зразка $L = 60$ мм за умов одновісного розтягу на гідравлічній випробувальній машині ZD 100 Pu. Осьову деформацію зразків вимірювали за методом тензометрії. Також проводили оцінювання інтенсивності локальних деформацій за аналізом цифрових зображень поверхні програмним комплексом TOMSC [1].

Виявлено, що наявність розвиненої мережі дефектів суттєво змінює деформівну здатність матеріалу. На відміну від суцільного середовища, у якому деформування починається з мікрорівня, у матеріалі з множинними макродефектами деформації і переміщення визначаються розмірами та взаємним розташуванням дефектів (тріщин, розломів) і проміжків між ними, які можна розглядати як блоки. Наявність просторового градієнту піддатливості спричиняє неоднорідність полів деформацій у таких матеріалах, тому їх можна віднести до розломно-блокових середовищ.

Розроблено методику, яка забезпечує автоматичне ідентифікувати зони найбільшого накопичення поверхневих дефектів на різних стадіях деформування зразка. Показано також, що структурна адаптація розтрісканого

матеріалу може супроводжуватися процесами перерозподілу локалізованого стану в делокалізований. Виявлено, що одним з основних механізмів деформування є розкриття дефектів і деформація областей з максимальним градієнтом напружень.

Виявлено, що система тріщин термомеханічної втоми є впорядкованим структурним утворенням, яке виникло та розвинулось внаслідок адаптації матеріалу до зовнішнього силового впливу.

Аналіз форми та деформаційної поведінки блочних структур дослідженого темплету, активація та перерозподіл зсувних та ротаційних процесів в околі розломів свідчить про самоорганізацію процесів деформування у поверхневих шарах роликів МБЛЗ.

Запропоновано фізико-механічну інтерпретацію стадійності процесів деформування матеріалу з множинними дефектами, яка забезпечується узгодженістю деформації матеріалу і розкриття дефектів. Враховуючи градієнт властивостей матеріалу з тріщинами у перерізі зразка, його, у першому наближенні, можна розглядати як композит, що містить розорієнтовані фрагменти матеріалу, оточені тріщинами.

Експериментально доведено взаємозв'язок параметрів множинного розтріскування та деформаційних характеристик матеріалу, показано основні закономірності зміни масштабно-інваріантних розподілів тріщин при переході від локалізованого до макроскопічного руйнування. Проаналізовано умови локалізації деформацій, вплив виду напруженого стану на характер руйнування матеріалу. З використанням оптичної системи аналізу полів деформацій досліджено закономірності локалізації пластичної деформації в місцях концентрації напружень. Урахування структурних особливостей матеріалу дозволило ідентифікувати основні стадії еволюції пошкоджень в матеріалі. Виявлено взаємозв'язок між стадіями формозміни твердого тіла та характером механічного впливу на нього.

Встановлено, що ієрархічна будова розломно-блокового середовища не лише підвищує деформівну здатність матеріалу, але й надає йому нових властивостей, докорінно змінюючи напрям локальних зсувів та зміщень.

Одержані результати використано при розробленні методів технічного діагностування стану металургійного обладнання, зокрема роликів МБЛЗ, що дозволило урахувати вплив тріщиноподібних дефектів на напружено-деформований стан конструкції. З одного боку, значна кількість дефектів співмірних розмірів розвантажує зони концентрації напружень, проте їх індивідуальне підростання або коалесценція можуть спричинити появу тріщини більшого масштабу рівня і подальше непрогнозоване руйнування конструкції.

1. V.E. Panin, Russian Physics Journal **38**, 1117 (1995).
2. S.G. Psakhie, Y. Horie, G.P. Ostermeyer *et al*, Theoretical and Applied Fracture Mechanics **37**, 311 (2001).

АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК

Андріішин І.М.	89	Галушак М.О.	36
Базар М.С.	181	Гевак Т.П.	84
Балабан О.В.	62,134	Гладьо В.Б.	128
Бандура Ю.В.	84	Головко Л.Ф.	114,122
Бардашевська С.Д.	75	Гольський В.Б.	47
Басістий П.В.	163,176	Горічок І.В.	75
Бахматюк Б.П.	59	Григорчак І.І.	54,56,62
Бачеріков Ю.Ю.	98	Грицак Р.І.	80
Бачинський Ю.Г.	163,176	Гуль Р.В.	111
Бачук В.В.	27	Гургула Г.Я.	83
Біліна І.С.	25	Даньків О.О.	7
Білінський І.В.	42,44,46,47	Держко О.В.	140
Біщанюк Т.М.	62	Дзумедзей Р.О.	77,84,170
Блощицин М.С.	122	Дзундза Б.С.	23,39
Бобицький Я.В.	49	Дідух Л.Д.	153
Бойко І.В.	119	Довгоп'ятий Ю.М.	153
Бойчук В.І.	42,44,46,47	Дрогобицький Ю.В.	127
Большакова І.А.	93	Дубленич Ю.В.	141
Бордун І.М.	180	Дубовой А.Г.	10
Бурбан О.В.	106	Дувіряк А.А.	143
Бучацький Л.П.	69	Жировецький В.М.	124
Вадюк М.П.	86	Журавков М.А.	188
Велигорська М.В.	180	Загладько І.М.	143
Венгрин Б.Я.	134	Заянчуковський О.В.	148,149
Вінтоняк Т.П.	83	Іваницький Р.І.	160,176
Возняк О.М.	23	Кардашев Д.Л.	68
Войтко М.В.	131	Кардашев К.Д.	68
Вороняк Л.Я.	46	Ковалюк Б.П.	124,125,130
Гаврилюк В.Я.	181	Кожушко Б.В.	73

Козицький С.В.	95,98,148,149	Лоцько О.П.	104
Козловський М.П.	151	Лукіянець Б.А.	41,54,56
Колядинський І.М.	177	Луньов С.В.	106
Коноваленко І.В.	188	Макідо О.Ю.	93
Коровицький А.М.	177	Марущак П.О.	188
Корсун В.	164	Маньовська О.А.	125,128
Кость Я.Я.	93	Матулка Д.В.	54,56
Костюк О.Б.	23	Межиловська Л.Й.	6
Котик М.В.	84	Мирончук Г.Л.	177
Котлярчук Б.К.	49,124,168	Михайлова Г.Ю.	10,15
Кравченко В.М.	69	Могильчак К.Ю.	69
Крамар О.І.	153,156	Мохун С.В.	176
Криницький О.С.	36	Мочарський В.С.	124,130
Крупніцька О.М.	150	Наговська І.В.	160
Крушельницька Т.Д.	48	Надрага О.Р.	18
Кузик О.В.	7	Назарчук П.Ф.	106
Купоров В.М.	152	Наконечний М.С.	163
Курепа А.С.	59	Никируй Л.І.	77
Куриляк Д.Б.	65,131	Никируй Р.І.	33
Кушнір Т.П.	39	Нищенко М.М.	10,12,15
Лазарюк В.В.	183	Нікіфоров Ю.М.	124,125,128,130
Лесюк Р.І.	49	Оліх О.Я.	101
Лецин Р.Б.	39	Оліх Я.М.	104
Лешко Р.Я.	42	Онісімчук В.В.	124
Лисак А.В.	27	Орлецький І.Г.	43
Литовченко В.Г.	70	Пазюк Р.І.	47
Лісний Б.М.	159	Панін С.В.	188
Лісняк П.Г.	111	Паращук Т.О.	80
Ліщинський І.М.	25,26	Пелещак Р.М.	7
Лоп'янок М.А.	33	Петченко Г.О.	108

Петченко О.М.	108	Ткачук А.І.	36
Попович Д.І.	124	Ткачук В.І.	52
Потяк В.Ю.	25	Товстюк Н.К.	48
Приходько Г.П.	10	Трохимчук П.П.	137
Прокопів В.В.	20	Туровська Л.В.	89
Прокоп'юк В.А.	160	Турянська Л.М.	42
Пулька Ч.В.	181	Фрасуняк В.М.	43
Пташник О.І.	86	Фреїк Д.М.	4,27,39
Пташник В.В.	180	Фреїк Н.Д.	83
Рацька Н.Б.	161	Фролов Г.А.	12
Романік Р.В.	151	Химич Г.П.	171
Рувінський Б.М.	145	Цапко Е.А.	15
Рувінський М.А.	145	Чобанюк В.М.	4,80
Рудь Ю.П.	69	Шаклеїна І.О.	44
Савчук А.Й.	52	Шаблій О.М.	181
Садова М.М.	180	Шарабура О.М.	65
Салій Я.П.	6,27	Швець В.Т.	148,149
Сартинская Л.Л.	12	Шевченко М.Я.	15
Сахарчук В.В.	177	Шевченко Н.А.	12
Сенчишин В.С.	181	Шевчук І.С.	46
Середницький А.С.	124	Шендеровський В.А.	71,73
Сеті Ю.О.	119	Шуригін Ф.М.	93
Сидорченко І.М.	12,15	Юрчишин І.К.	18
Скоренький Ю.Л.	153	Юрчишин Л.Д.	89
Смолінський М.М.	52	Яворський Б.І.	185
Соколов О.Л.	25	Яворський Р.С.	30
Сокольник О.А.	44	Яворський Я.С.	26,30
Тимочко М.Д.	104	Янушкевич В.А.	125
Ткач М.В.	119	Яшук В.М.	69
Ткачук Р.А.	185		

ЗМІСТ

Фреїк Д.М., Чобанюк В.М. НАПІВПРОВІДНИКОВІ НАНОСТРУКТУРИ І ПРОБЛЕМИ ТЕРМОЕЛЕКТРИКИ	4
Салій Я.П., Межиловська Л.Й. ПІДСИСТЕМА ДЕФЕКТІВ У ТОНКОПЛІВКОВИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СТРУКТУРАХ	6
Пелещак Р.М., Кузик О.В., Даньків О.О. РОЛЬ ЕЛЕКТРОН-ДЕФОРМАЦІЙНИХ ЕФЕКТІВ У ФОРМУВАННІ АКУСТОЕЛЕКТРОННИХ, АКУСТООПТИЧНИХ ТА БАРИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ КВАНТОВО-РОЗМІРНИХ СИСТЕМ	7
Михайлова Г.Ю., Нищенко М.М., Дубовой А.Г., Приходько Г.П. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ НАНОКОМПОЗИТА LaNi_5 – УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ	10
Сидорченко И.М., Нищенко М.М., Шевченко Н.А., Фролов Г.А., Сартинская Л.Л. ЭМИССИОННОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГИИ В ЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАНОСТРУКТУРНЫХ КАТОДОВ	12
Нищенко М.М., Шевченко М.Я., Сидорченко І.М., Цапко Е.А., Михайлова Г.Ю. ФІЗИЧНІ ЯВИЩА І ЕФЕКТИ В БАГАТОШАРОВИХ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБКАХ І МОЖЛИВОСТІ ЇХ ЗАСТОСУВАННЯ	15
Юрчишин І.К., Надрага О.Р. КВАНТОВО-РОЗМІРНІ ЕФЕКТИ У НАНОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВІ СПОЛУК IV-VI	18
Прокопів В.В. МЕХАНІЗМИ ФОРМУВАННЯ ДЕФЕКТНОЇ ПІДСИСТЕМИ У ПАРОФАЗНИХ КОНДЕНСАТАХ КАДМІЙ ТЕЛУРИДУ	20
Дзундза Б.С., Костюк О.Б., Возняк О.М. ПОВЕРХНЕВІ ЯВИЩА І МЕХАНІЗМИ РОЗСІЮВАННЯ В ТОНКИХ ПЛІВКАХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СПОЛУК	23
Соколов О.Л., Ліщинський І.М., Потяк В.Ю., Біліна І.С. ПРОЦЕСИ ФОРМУВАННЯ І СТРУКТУРА ПАРОФАЗНИХ КОНДЕНСАТІВ КАДМІЙ ТЕЛУРИДУ	25

Яворський Я.С., Ліщинський І.М. ТОПОЛОГІЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ЗАРОДЖЕННЯ І РОСТУ НАНОСТРУКТУР МЕТАЛІЧНОГО СРІБЛА У НАНОСТРУКТУРАХ $Ag BbTe $ СЛЮДА	26
Фреїк Д.М., Бачук В.В., Салій Я.П., Лисак А.В. ПРОЦЕСИ ОСВАЛЬДІВСЬКОГО ДОЗРІВАННЯ У НАНОСТРУКТУРАХ ПЛЮМБУМ ТЕЛУРИДУ, ВИРОЩЕНИХ ІЗ ПАРОВОЇ ФАЗИ	27
Яворський Я.С., Яворський Р.С. КОНСТРУКТИВНІ ОСОБЛИВОСТІ ВАКУУМНИХ МІКРОПІЧОК ДЛЯ ОСАДЖЕННЯ ТОНКИХ ПЛІВОК І НАНОСТРУКТУР	30
Лоп'янюк М.А., Никируй Р.І. ОПТИМІЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ ВИРОЩУВАННЯ ТОНКОПЛІВКОВИХ СТРУКТУР ZNS МЕТОДОМ ГАЗОДИНАМІЧНОГО ПОТОКУ ПАРИ	33
Галушак М.О., Ткачук А.І., Криницький О.С. МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ ТОНКОПЛІВКОВИХ КОНДЕНСАТІВ	36
Фреїк Д.М., Дзундза Б.С., Лецин Р.Б., Кушнір Т.П. АВТОМАТИЗОВАНА УСТАНОВКА ДЛЯ ВИМІРЮВАННЯ КІНЕТИЧНИХ КОЕФІЦІЄНТІВ ТОНКИХ ПЛІВОК	39
Лукинянець Б.А. НАНООБ'ЄКТИ З ТОЧКИ ЗОРУ ЕЛЕКТРОНІКИ	41
Бойчук В.І., Білинський І.В., Лешко Р.Я., Турянська Л.М. СПЕКТР СФЕРИЧНОЇ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ З ДВОМА ІОНАМИ ДОМІШКИ	42
Орлецький І.Г., Фрасуняк В.М. ФОТОЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ГЕТЕРОСТРУКТУР ІТО/n-GaP/n ⁺ -GaP, ВИГОТОВЛЕНИХ СПРЕЙ-ПІРОЛІЗОМ	43
Бойчук В.І., Білинський І.В., Сокольник О.А., Шаклеїна І.О. ВПЛИВ ФОРМИ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ ГЕТЕРОСИСТЕМИ GaAs/AlAs НА КОЕФІЦІЄНТ ПОГЛИНАННЯ ПРИ МІЖРІВНЕВИХ ДІРКОВИХ ПЕРЕХОДАХ	44
Бойчук В.І., Білинський І.В., Шевчук І.С., Вороняк Л.Я. ПРИРОДА ЗСУВУ СТОКСА В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ ПОМІЩЕНИХ В НАПІВПРОВІДНИКОВУ МАТРИЦЮ	46

Бойчук В.І., Білінський І.В., Пазюк Р.І., Гольський В.Б. СПЕКТР ЕЛЕКТРОНІВ ТА ЕКСИТОНІВ У НАДГРАТКАХ ЗІ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК	47
Товстюк Н.К., Крушельницька Т.Д. УМОВИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДУ В ПІДСИСТЕМІ ЛІТІЄВОГО ІНТЕРКАЛЯНТА В ШАРУВАТИХ КРИСТАЛАХ	48
Лесюк Р.І., Котлярчук Б.К., Бобицький Я.В. ФОРМУВАННЯ НАНОЗЕРНИСТИХ ТОВСТИХ ПЛІВОК СРІБЛА ЯК СТРУМОПРОВІДНИХ ЕЛЕМЕНТІВ ДРУКОВАНИХ ПЛАТ	49
Смолінський М.М., Савчук А.Й., Ткачук В.І. СИНТЕЗ НАНОКРИСТАЛІВ СУЛЬФІДУ КАДМІЮ МЕТОДОМ УЛЬТРАЗВУКОВОГО СПРЕЙ-ПІРОЛІЗУ	52
Матулка Д.В., Григорчак І.І., Лукіянець Б.А. Li ⁺ -ІНТЕРКАЛЯЦІЙНЕ СТРУМОУТВОРЕННЯ У СУПРАМОЛЕКУЛЯРНИХ АНСАМБЛЯХ ІЄРАРХІЧНОЇ АРХІТЕКТУРИ	54
Матулка Д.В., Григорчак І.І., Лукіянець Б.А. ІМПЕДАНСНИЙ ВІДГУК ТА КВАНТОВА ЄМНІСТЬ КЛАТРАТИВ КОНФІГУРАЦІЇ НЕОРГАНІЧНИЙ НАПІВПРОВІДНИК / ОРГАНІЧНИЙ КОНТЕНТ	56
Курепа А.С., Бахматюк Б.П. ДОСЛІДЖЕННЯ ІНТЕРКАЛЯЦІЇ ЙОДУ НА ПОВЕРХНІ АКТИВОВАНОГО ВУГЛЕЦЕВОГО МАТЕРІАЛУ	59
Біщанюк Т.М., Балабан О.В., Григорчак І.І. ФОРМУВАННЯ ТА ВЛАСТИВОСТІ ІНТЕРКАЛАТКНИХ НАНОСТРУКТУР КОНФІГУРАЦІЇ НЕОРГАНІЧНИЙ НАПІВПРОВІДНИК / СЕГНЕТОЕЛЕКТРИЧНИЙ РІДКИЙ КРИСТАЛ	62
Куриляк Д.Б., Шарабура О.М. ВПЛИВ КРАЇВ ДІАФРАГМИ НА БЛИЖНЄ ПОЛЕ КОНІЧНОГО ЗОНДА ЗА ОСЕСИМЕТРИЧНОГО ЗБУДЖЕННЯ	65
Кардашев Д.Л., Кардашев К. ЛОКАЛЬНА ГУСТИНА ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ ГРАФЕНУ	68

Кравченко В.М., Могильчак К.Ю., Рудь Ю.П., Буцацький Л.П., Ящук В.М. СПЕКТРАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ ІРИДОВІРУСУ КОМАРА, ЙОГО КАПСИДНИХ БІЛКІВ, ЛІПІДІВ ТА ДНК	69
Литовченко В.Г. СОНЯЧНА ЕНЕРГЕТИКА: ДОСЯГНЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ	70
Шендеровський В.А. ДЕЯКІ АСПЕКТИ З ІСТОРІЇ СТАНОВЛЕННЯ ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ В УКРАЇНІ	71
Кожушко Б.В., Шендеровський В.А. НАРОДЖЕНИЙ ЧЕРНІГІВСЬКОЮ ЗЕМЛЕЮ (ДО 150-РІЧЧЯ ВІД ДНЯ НАРОДЖЕННЯ ВИДАТНОГО ВЧЕНОГО-КРИСТАЛОФІЗИКА ГЕОРГІЯ ВУЛЬФА)	73
Горічок І.В., Бардашевська С.Д. ТЕРМОДИНАМІКА ДЕФЕКТНИХ ПІДСИСТЕМ КРИСТАЛІВ СПОЛУК ІІ-VІ, ІV-VІ	75
Никируй Л.І., Дзумедзей Р.О. ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ЛЕГОВАНОГО ПЛЮМБУМУ ТЕЛУРИДУ ТА ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ НА ЙОГО ОСНОВІ	77
Чобанюк В., Паращук Т.О., Грицак Р.І. КВАНТОВО-ХІМІЧНИЙ АНАЛІЗ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ У КРИСТАЛАХ ЦИНК ХАЛЬКОГЕНІДІВ	80
Гургула Г.Я., Фреїк Н.Д., Вінтоняк Т.П. КРИСТАЛОХІМІЯ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ ТА ЇХ КОМПЛЕКСІВ У НЕСТЕХІОМЕТРИЧНИХ ТЕ ЛЕГОВАНИХ КРИСТАЛАХ ЦИНК ХАЛЬКОГЕНІДІВ	83
Дзумедзей Р.О., Гевак Т.П., Бандура Ю.В., Котик М.В. ОСОБЛИВОСТІ РОЗРАХУНКУ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ КРИСТАЛІВ PbTe:Sb(Bi)	84
Вадюк М.П., Пташник О.І. ДЕФЕКТНА ПІДСИСТЕМА І ВЛАСТИВОСТІ ІЗОВАЛЕНТНО ЛЕГОВАНИХ КРИСТАЛІВ ЦИНК СЕЛЕНІДУ	86
Туровська Л.В., Юрчишин Л.Д., Андріішин І.М. КРИСТАЛОХІМІЧНІ МОДЕЛІ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ КРИСТАЛІЧНИХ СТРУКТУР НА ОСНОВІ ГЕРМАНІЙ, СТАНУМ І ПЛЮМБУМ ТЕЛУРИДІВ	89

Кость Я.Я., Большакова І.А., Макідо О.Ю., Шуригін Ф.М. ВІДТВОРЮВАНІ ТЕХНОЛОГІЇ ВИРОЩУВАННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ВІСКЕРІВ	93
Козицький С.В. ЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ZnS, ОТРИМАНОГО МЕТОДОМ САМОПОШИРЮВАННЯ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗУ	95
Козицький С.В., Бачеріков Ю.Ю. ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ ZnS:Cu, ОТРИМАНОГО МЕТОДОМ САМОПОШИРЮВАННЯ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗУ	98
Оліх О.Я. ВПЛИВ УЛЬТРАЗВУКУ НА ТЕРМОЕМІСІЙНІ ПРОЦЕСИ В Mo/n-n+-Si СТРУКТУРАХ	101
Тимочко М.Д., Лоцько О.П., Оліх Я.М. ВПЛИВ УЛЬТРАЗВУКОВОГО НАВАНТАЖЕННЯ НА ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ МОНОКРИСТАЛІВ CdTe:Cl	104
Луньов С.В., Бурбан О.В., Назарчук П.Ф. ВПЛИВ ІНВЕРСІЇ ТИПУ ($L_1 - \Delta_1$) АБСОЛЮТНОГО МІНІМУМУ НА ТЕНЗОЧУТЛИВІСТЬ КРИСТАЛІВ ГЕРМАНІЮ	106
Петченко Г.О., Петченко О.М. ВИВЧЕННЯ ВПЛИВУ РЕНТГЕНІВСЬКОГО ОПРОМІНЕННЯ В ІНТЕРВАЛІ 0-1000 Р НА ДИНАМІЧНЕ ГАЛЬМУВАННЯ ДИСЛОКАЦІЙ У МОНОКРИСТАЛАХ LiF	108
Гуль Р.В., Лісняк П.Г. ВПЛИВ ПАРІВ ЕФІРУ НА ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ПАРАМЕТРИ ГЕТЕРОСТРУКТУР SnO ₂ – n– Si	111
Головко Л.Ф. НОВІТНІ ЛАЗЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ В ПОВЕРХНЕВІЙ ОБРОБЦІ МАТЕРІАЛІВ	114
Ткач М.В., Бойко І.В., Сеті Ю.О. ТЕОРІЯ АКТИВНОЇ ПРОВІДНОСТІ АКТИВНОЇ ЗОНИ КВАНТОВОГО КАСКАДНОГО ЛАЗЕРА У ПОПЕРЕЧНОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ	119

Головко Л.Ф., Блощин М.С. ПІДВИЩЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ПРОЦЕСУ ЛАЗЕРНОГО ГАЗОПОРОШКОВОГО НАПЛАВЛЕННЯ ЗАСТОСУВАННЯМ ЕНЕРГІЇ ПЛАЗМОВОГО СТРУМЕНЯ	122
Жировецький В.М., Ковалюк Б.П., Котлярчук Б.К., Мочарський В.С., Нікіфоров Ю.М., Онісімчук В.В., Попович Д.І., Середницький А.С. ЛАЗЕРНА УДАРНО-ХВИЛЬОВА ОБРОБКА НАНОПОРОШКОВОГО ZnO	124
Нікіфоров Ю.М., Ковалюк Б.П., Маньовська О.А., Янушкевич В.А. ЛАЗЕРНІ УДАРНІ ХВИЛІ МАЛОЇ АМПЛІТУДИ: ОСОБЛИВОСТІ ВПЛИВУ ТА ЗАСТОСУВАННЯ	125
Дрогобицький Ю.В. РОЗІГРІВ МАСИВНИХ ЗРАЗКІВ СЕРІЮ ІМПУЛЬСІВ	127
Маньовська О.А., Нікіфоров Ю.М., Гладько В.Б. ЕЛЕКТРОННА МІКРОСКОПІЯ РЕЛЬЄФУ ПОВЕРХНІ МІДІ ТА СТАЛІ, ОПРОМІНЕНИХ В РІЗНИХ СЕРЕДОВИЩАХ	128
Нікіфоров Ю.М., Ковалюк Б.П., Мочарський В.С. ПРОСВІТЛЕННЯ ПОЛІТЕТРАФТОРЕТИЛЕНОВОЇ ПЛІВКИ ПІСЛЯ ЛАЗЕРНОГО БОМБАРДУВАННЯ НАНОТРУБКАМИ	130
Куриляк Д.Б., Войтко М.В. РЕЗОНАНСНЕ РОЗСІЮВАННЯ ПРУЖНОЇ SH-ХВИЛІ ДЕФЕКТОМ НА ПОВЕРХНІ З'ЄДНАННЯ ПЛАСТИНИ І ПІВПРОСТОРУ	131
Балабан О.В., Венгрин Б.Я. ПРОЯВИ ВПЛИВУ УЛЬТРАЗВУКУ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ВУГЛЕЦЕВИХ МАТЕРІАЛІВ	134
Трохимчук П.П. РЕЛАКСАЦІЙНА ОПТИКА ТА СИНЕРГЕТИКА	137
Держко О.В. ПЛОСКОЗОННИЙ ФЕРОМАГНЕТИЗМ МІЛЬКЕ-ТАСАКІ	140
Дубленич Ю.В. КОНТИНУУМ АПЕРІОДИЧНИХ СТРУКТУР У ҐРАТКОВОМУ ГАЗІ НА ТРИКУТНІЙ ҐРАТЦІ	141

Загладько І.М., Дувіряк А.А. МОДЕЛЬ ТИПУ ЮКАВИ В ТЕОРІЇ ПРЯМИХ ВЗАЄМОДІЙ: ПРОБЛЕМИ ПУАНКАРЕ-ІНВАРІАНТНОСТІ ТА УНІТАРНОСТІ МАТРИЦІ РОЗСІЯННЯ	143
Рувінський Б.М., Рувінський М.А. ОПТИЧНА ПРОЗОРІСТЬ ДОПОВАНОГО ГРАФЕНУ У ПОСТЛІНІЙНОМУ ВІДГУКУ	145
Швець В.Т., Козицький С.В., Заянчуковський О.В. РІВНЯННЯ СТАНУ МЕТАЛІЧНОГО ГЕЛІЮ	148
Швець В.Т., Козицький С.В., Заянчуковський О.В. МЕТАЛІЧНИЙ ГЕЛІЙ І ВНУТРІШНЯ БУДОВА ЮПІТЕРА	149
Крупницька О.М. НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ ДЕФОРМОВАНОГО РОМБІЧНОГО СПІНОВОГО ЛАНЦЮЖКА У СИЛЬНОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ	150
Романік Р.В., Козловський М.П. ТЕРМОДИНАМІЧНІ ФУНКЦІЇ ТРИВИМІРНОЇ ІЗІНГОПОДІБНОЇ МОДЕЛІ В ЗОВНІШНЬОМУ ПОЛІ	151
Купоров В.М. ДИНАМІКА БІНАРНИХ НЕЙТРАЛЬНИХ ТА ІОННИХ РІДИН: ПІДХІД УЗАГАЛЬНЕНИХ КОЛЕКТИВНИХ МОД І ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ	152
Дідух Л.Д., Довгоп'ятий Ю.М., Крамар О.І., Скоренький Ю.Л. МОДИФІКОВАНА ФОРМА ПОЛЯРНОЇ МОДЕЛІ: ЕФЕКТИ МІЖЕЛЕКТРОННИХ ВЗАЄМОДІЙ	153
Крамар О.І. ВПЛИВ ФОРМИ ГУСТИНИ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ НА ХІМІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ В УЗАГАЛЬНЕНІЙ МОДЕЛІ ГАББАРДА	156
Лісний Б.М. ОСНОВНИЙ СТАН І ТЕРМОДИНАМІКА СПІН-1/2 АСИМЕТРИЧНОГО РОМБІЧНОГО ЛАНЦЮЖКА ІЗІНГА-ГАЙЗЕНБЕРГА	159
Наговська І.В., Прокоп'юк В.А., Іваницький Р.І. ФІЗИЧНИЙ МЕХАНІЗМ ВПЛИВУ ВОДНЮ НА КОНСТАНТУ МАГНІТОСТРИКЦІЇ ФЕРИМАГНІТНИХ СПЛАВІВ НА ОСНОВІ <i>d</i> -ПЕРЕХІДНИХ ТА РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНИХ МЕТАЛІВ	160

Рацька Н.Б. ВПЛИВ ПАРАМЕТРІВ ОКСИДУВАННЯ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВИЙ СТАН ТА ВЛАСТИВОСТІ СПЛАВУ СИСТЕМИ Nb-Ti	161
Бачинський Ю.Г., Басістий П.В., Наконечний М.С. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МІКРОМАГНІТНОГО РОЗПОДІЛУ ПОВЕРХНІ ОДНОШАРОВОЇ ПЛІВКИ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО	163
Корсун В. ТРАНСФЕР ТЕХНОЛОГІЙ, ІННОВАЦІЇ ТА ПІДПРИЄМНИЦТВО - ЦЕ СТИМУЛЯТОРИ РОЗВИТКУ УКРАЇНСЬКОЇ НАУКИ	164
Котлярчук Б.К. УКРАЇНСЬКИЙ НАУКОВО-ТЕХНОЛОГІЧНИЙ ЦЕНТР: ЦІЛІ, ПРОГРАМИ ТА ПРІОРИТЕТИ ДІЯЛЬНОСТІ	168
Дзумедзей Р.О. ЗАХИСТ ПРАВ ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ ВЛАСНОСТІ У МІЖНАРОДНИХ ДОСЛІДНИЦЬКИХ ПРОЕКТАХ	170
Химич Г.П. НАУКОВІ ПАРКИ - МЕХАНІЗМИ ВПРОВАДЖЕННЯ ІННОВАЦІЙ У ВИРОБНИЦТВО	171
Бачинський Ю.Г., Басістий П.В., Мохун С.В., Іваницький Р.І. ВПЛИВ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СТАНУ ВОДНЮ НА ЙОГО РОЗЧИННІСТЬ У РЕАКТОРНИХ СТАЛЯХ	176
Коровицький А.М., Колядинський І.М., Сахарчук В.В., Мирончук Г.Л. ОПТИМІЗАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЇ ОТРИМАННЯ СТАБІЛЬНОГО ПЛАЗМОВОГО РОЗРЯДУ У ВАКУУМНІЙ КАМЕРІ ВУП5М ПРИ МАГНЕТРОННОМУ РОЗПОРОШЕННІ	177
Бордун І.М., Пташник В.В., Садова М.М., Велигорська М.В. ЗМІНА ГІДРОФОБНОСТІ АКТИВОВАНОГО ВУГІЛЛЯ В РЕЗУЛЬТАТІ ОБРОБКИ ЕЛЕКТРОХІМІЧНО АКТИВОВАНИМИ ВОДНИМИ РОЗЧИНАМИ	180
Шаблій О.М., Пулька Ч.В., Сенчишин В.С., Гаврилюк В.Я., Базар М.С. ВИКОРИСТАННЯ ЛАЗЕРНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ ДЛЯ ЗМІЦНЕННЯ ДЕТАЛЕЙ МАШИН	181
Лазарюк В.В. ЗАСТОСУВАННЯ МЕТАЛОКЕРАМІЧНИХ ТВЕРДИХ СПЛАВІВ ДЛЯ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНИХ ТВЕРДООКСИДНИХ ПАЛИВНИХ КОМІРОК	183

Ткачук Р.А., Яворський Б.І. КОНТРОЛЬ ЕНЕРГІЇ ТЕСТОВОГО ПОДРАЗНЕННЯ ПРИ КВАНТОВІЙ РЕТИНОГРАФІЇ	185
Марущак П.О., Коноваленко І.В., Панін С.В., Журавков М.А. АНАЛІЗ ДЕФОРМУВАННЯ МАТЕРІАЛУ З МНОЖИННИМИ ТРІЩИНАМИ ТЕРМОМЕХАНІЧНОЇ ВТОМИ ЯК РОЗЛОМНО-БЛОКОВОГО СЕРЕДОВИЩА	188
АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК	190