

Міністерство освіти і науки України

Тернопільський національний технічний університет
імені Івана Пулюя

Українське фізичне товариство



МАТЕРІАЛИ

НАУКОВОГО СЕМІНАРУ

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

АПТЕФ 2010

м. Тернопіль,

27-28 січня 2010 року

Матеріали наукового семінару “Актуальні проблеми теоретичної та експериментальної фізики” (м. Тернопіль, 27-28 січня 2010 року) – Тернопіль ТНТУ, 2010 – 59 с.

У цьому виданні представлені роботи молодих українських науковців в галузі фізики конденсованого стану, в тому числі фізики металів, напівпровідників, наносистем, біофізики, які доповідалися та обговорювалися під час наукового семінару “Актуальні проблеми теоретичної та експериментальної фізики”, проведеного у Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя з метою розширення наукових зв’язків, підтримки досліджень молодих науковців та узагальнення нових теоретичних і прикладних результатів.

Організаційний комітет семінару:

Юрій Скоренький (Тернопіль)

Олександр Крамар (Тернопіль)

Владислав Кравченко (Київ)

Тарас Мисакович (Львів)

Юрій Дрогобицький (Тернопіль)

Володимир Дзюра (Тернопіль)

<http://aptef.at.ua>

© Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, 2010р.

Програма семінару

Середа, 27 січня 2010 року

11:00 - відкриття семінару, вітальне слово проректора з наукової роботи ТНТУ проф. Рогатинського Р.М.

11:10 - вітальне слово завідувача кафедри фізики ТНТУ проф. Дідуха Л.Д.

11:20 - "Дослідження електронних систем із сильними кореляціями у ТНТУ ім. І.Пулюя" - Скоренький Ю.Л. (м. Тернопіль, ТНТУ ім. І.Пулюя)

11:45 - "Українське фізичне товариство: історія, досягнення, проблеми й перспективи" - Кравченко В.М. (виконавчий секретар бюро УФТ, м. Київ, КНУ ім. Т.Г.Шевченка)

12:10 - "Вплив форми модельної густини електронних станів на електричні та магнітні властивості вузькозонних матеріалів" - Крамар О.І. (м. Тернопіль, ТНТУ ім. І.Пулюя)

12:35 - "Моделі Бозе та Бозе-Фермі-Хаббарда при скінченних температурах" - Мисакович Т.С. (м. Львів, ІФКС НАН України)

13:00 - 14:30 - перерва на обід. Прогулянка Тернополем.

14:30 - "Екситонний спектр масиву шестигранних нанотрубок з врахуванням екситон-фононої взаємодії" - Довганюк М.М. (м. Чернівці, ЧНУ ім. Ю.Федьковича)

14:55 - "Магнітні і теплові властивості спін-1/2 деформованого ромбічного ланцюжка Ізінга-Габбарда" - Лісний Б.М. (м. Львів, ІФКС НАН України)

15:20 - "Про форму рівняння балансу для густини кінетичної енергії у кінетичній варіаційній теорії" - Гуменюк Й.А. (м. Львів, ІФКС НАН України)

15:45- "Транспортні явища у твердих розчинах на основі сполук IV-VI" - Никируй Л.І. (м. Івано-Франківськ, ПНУ ім. В.Стефаніка)

16:10 - 16:30 - перерва на каву, обговорення доповідей

16:30 - "Аутофлуоресценція біологічних тканин та її використання для діагностики ракових захворювань" - Кравченко В.М. (м. Київ, КНУ ім. Т.Г.Шевченка)

16:55 - "Структура та електропровідність ультратонких плівок металів" - Пенюх Б.Р. (м. Львів, ЛНУ ім. І.Франка)

17:20 - "Люмінесцентні властивості мікрокристалів $\text{BaCl}_2\text{-Eu}$, вкраплених в матрицю NaCl " - Вістовський В.В. (м. Львів, ЛНУ ім. І.Франка)

17:45 - "Комп'ютерне моделювання процесу впровадження вуглецевих нанотрубок в матеріал під дією лазерних ударних хвиль" - Маньовська О.А. (м. Тернопіль, ТНТУ ім. І.Пулюя)

18:10 - "Вплив електромагнітного поля на наноструктурні системи та дисперсні середовища" - Куницька Л.Ю. (м. Київ, КНАУ)

18:30 - "Кінетичні явища у легованих індієм кристалах на основі PbTe " – Дзумедзей Р.О. (м. Івано-Франківськ, ПНУ ім. В.Стефаника)

19:00 - дружня вечеря

Четвер, 28 січня 2010 року

10:30 - 12:30 - Екскурсія по ТНТУ ім. І. Пулюя

12:30 - Презентація науково-дослідної лабораторії Центру колективного користування приладами НАН України "Діагностика напівпровідникових матеріалів, структур та приладних систем" ІФН НАН України при Луцькому національному технічному університеті - Коровицький А.М. (м. Луцьк, ЛНТУ)

13:00 - "Вплив глибоких енергетичних рівнів на п'єзоопір $n\text{-Si}$ " - Луньов С.В. (м. Луцьк, ЛНТУ)

13:25 - "Визначення коефіцієнту дифузії водню в гідридотвірних металах" - Мохун С.В. (м. Тернопіль, ТНПУ ім. В. Гнатюка)

13:50 - 15:00 - перерва на обід.

15:00 - "Розробка морфометричного критерію гомогенності матеріалів на прикладі аналізу SiC депонованого на багат шарову структуру Fe/NiP " - Коровицький А.М. (м. Луцьк, ЛНТУ)

15:25 - "Конфігураційні представлення моделей наноструктурних низьковимірних електронних систем" - Скоренький Ю.Л. (м. Тернопіль, ТНТУ ім. І. Пулюя)

15:50 - "Про Дев'яту європейську конференцію з атомів, молекул і фотонів ЕСАМР ІХ" - Кравченко В.М. (м. Київ, КНУ ім. Т.Г.Шевченка)

16:30 - 16:50 - перерва на каву, обговорення доповідей

16:55 - "Особливості контактів метал-фторопласт з вуглецевими нанотрубками"
- Ржешевська О.І. (м. Тернопіль, ТНТУ ім. І. Пулюя)

17:20 – "Відносний відгук гетероструктур Al-(n-Sn₂)-p-Si-Al на зміну газового середовища" - Гуль Р.В. (м. Тернопіль, ТНТУ ім. І. Пулюя)

17:45 - "Дослідження поверхні (100) шаруватих напівпровідникових кристалів In₄Se₃ методами скануючих тунельних мікроскопії та спектроскопії" - Дверій О.Р. (м. Львів, ЛНУ ім. І.Франка)

18:10 - Круглий стіл

Матеріали семінару доступні для скачування на сайті <http://aptef.at.ua>

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

УКРАЇНСЬКЕ ФІЗИЧНЕ ТОВАРИСТВО: ІСТОРІЯ, ДОСЯГНЕННЯ, ПРОБЛЕМИ Й ПЕРСПЕКТИВИ

Кравченко В.М., Ящук В.М.

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
e-mail: krav@univ.kiev.ua*

Українське фізичне товариство (УФТ) – це всеукраїнська неприбуткова громадська організація, що об'єднує на основі професійних інтересів осіб, які працюють в галузі фундаментальної і прикладної фізики та її викладання, а також студентів фізичних спеціальностей вищих навчальних закладів України.

Метою Товариства є задоволення та захист творчих інтересів фізиків, сприяння створенню умов для їх роботи, розвитку фізичної освіти та фізичної науки і впровадженню наукових, технічних та методичних розробок в практику.

УФТ засновано 1990 року. 31 січня 1990 року відбувся Установчий з'їзд УФТ, на якому було прийнято Статут, визначено структуру та керівні органи Товариства. УФТ було першою недержавною самоврядною науковою організацією на території колишньої УРСР. Першим президентом УФТ було обрано академіка НАН України В.Г.Бар'яхтара, який обіймав цю посаду з 1990 по 1995 рік. Президентами УФТ були акад. НАНУ І.С.Горбань (1995 – 1998), член-кор. НАНУ С.М.Рябченко (1998 – 2001), проф. І.О.Вакарчук (2001 – 2004). Після VI з'їзду УФТ, який відбувся 18 червня 2004 року, президентом Товариства обрано члена-кор. НАНУ В.Г.Литовченка.

УФТ налічує в своїх лавах близько 700 членів, об'єднаних у 40 регіональних відділень та місцевих осередків, представлених провідними науково-дослідними інститутами та вищими навчальними закладами фізичного профілю в містах Києві, Харкові, Львові, Одесі, Ужгороді, Луцьку, Івано-Франківську, Чернівцях, Тернополі, Дніпропетровську, Черкасах, Кременчуці та ін.

УФТ проводить науково-просвітницькі заходи з метою популяризації фізичних знань та ствердження наукового світогляду в суспільстві (наукові семінари з актуальних проблем сучасної фізичної науки, публікації в пресі, виступи на радіо й телебаченні), організовує міжнародні та всеукраїнські наукові конференції, симпозіуми та семінари, допомагає молодим українським фізикам одержати закордонні гранти для участі у роботі європейських фізичних конференцій, ініціює незалежну громадську професійну експертизу проектів і програм на території України і проводить таку експертизу за запитом громадських та урядових організацій, а також постійно перебуває у пошуку прогресивних форм діяльності.

УФТ бере активну участь у роботі редколегій провідних вітчизняних наукових журналів, таких як «Український фізичний журнал» (Київ), «Журнал фізичних досліджень» (Львів), «Фізика напівпровідників, квантова електроніка та оптоелектроніка» (Київ), «Фізика металів та новітні технології» (Київ), «Досягнення у фізиці металів» (Київ), «Порошкова металургія та металічні

кераміки» (Київ), «Фізика низьких температур» (Харків), Фізика конденсованого стану (Львів), «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології» (Одеса), «Світ фізики» (видання для молоді, Львів), «Країна знань» (видання для молоді, Київ) та ін.

Щомісяця проводяться засідання наукових семінарів в осередках УФТ, метою яких є ознайомлення наукової громадськості з актуальними науковими проблемами та останніми досягненнями в галузі фізики, астрономії та в суміжних з фізикою науково-технічних галузях. Доповідачами семінарів є відомі українські та зарубіжні вчені.

За підтримки УФТ протягом 2001-2009 років проведено більше 30 міжнародних і всеукраїнських конференцій та семінарів, в тому числі Всеукраїнський з'їзд “Фізика в Україні” (3-6 жовтня 2005 року, м. Одеса).

УФТ є колективним членом Європейського фізичного товариства (ЄФТ) і співпрацює з фізичними товариствами Польщі та Угорщини, з Інститутом фізики Великої Британії.

Представники УФТ є членами Ради ЄФТ, беруть активну участь у роботі комітетів ЄФТ та організованих ним конференціях, організовують європейські наукові конференції в Україні, беруть участь у важливих європейських дослідницьких проектах. Українське фізичне товариство розповсюджує по своїх місцевих осередках інформаційно-аналітичний журнал Європейського фізичного товариства “Europhysics News”.

Молоді українські фізики, які є членами УФТ, мають можливість отримати гранти у розмірі до 350 євро для участі у роботі наукових конференцій, організованих або спонсорованих ЄФТ. Інформація про такі конференції та умови одержання грантів представлені на офіційному сайті ЄФТ за адресою: www.eps.org/conferences.

Офіційний інтернет-сайт Українського фізичного товариства: www.ups.kiev.ua.

ВПЛИВ ФОРМИ МОДЕЛЬНОЇ ГУСТИНИ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ НА ЕЛЕКТРИЧНІ ТА МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ ВУЗЬКОЗОННИХ МАТЕРІАЛІВ

Крамар О.І., Скоренький Ю.Л.

Тернопільський національний університет імені Івана Пулюя,

e-mail: kramar@tu.edu.te.ua

Одним з найперспективніших напрямків у сучасній фізиці конденсованого стану є вивчення унікальних фізичних властивостей матеріалів з сильними кулонівськими кореляціями [1]. Зокрема, зацікавлення викликають спостережувані в багатьох сполуках цього класу (в першу чергу, в сполуках перехідних металів) переходи діелектрик-метал, різноманітність типів магнітного впорядкування, взаємозв'язок електричних і магнітних властивостей. В останні роки, наприклад, інтенсивно досліджуються проблеми, пов'язані з реалізацією феромагнітного впорядкування у дихалькогенідах перехідних металів. Сильнокорельовані електронні системи володіють також незвичайними транспортними властивостями. Проведені дотепер теоретичні дослідження головним чином стосуються систем з густиною електронних станів (ГС) без особливостей. Незважаючи на значні зусилля дослідників, нерозв'язаною залишається проблема розрахунку при ненульових температурах провідності в моделі з корельованим переносом та ГС, яка відповідає реальним вузькозонним матеріалам.

В даній роботі для випадку сильної кулонівської кореляції з використанням методу функцій Гріна при дослідженні ефективного гамільтоніану однозонної узагальненої моделі Габбарда з корельованим переносом і обмінною взаємодією та при врахуванні зовнішніх тиску, магнітного поля в методі проектування [2] отримано одночастинкові енергетичні спектри; на цій основі показано важливість процесів трансляційного руху електронів для феромагнітного впорядкування в системі [3]. У роботі проведено розрахунок енергії основного стану для різних форм незбуреної ГС отримано (для основного стану) критичні концентрації, при яких магнітний момент виникає та досягає насичення, розраховано намагніченість. Також досліджено стабільність феромагнітного впорядкування на основі вивчення особливостей поведінки різниці енергій парамагнітного та феромагнітного основних станів. Отримані результати (залежності намагніченості від ступеня заповнення енергетичної зони та параметрів системи, критичні концентрації) в граничних випадках моделі добре узгоджуються з результатами інших підходів. Важливо відзначити результати стосовно впливу корельованого переносу на стабільність феромагнітного впорядкування при різних формах ГС в моделі вузькозонного матеріалу. Для випадку сильних кулонівських кореляцій корельований перенос обумовлює зменшення величини зсуву центрів спінових підзон і послаблює ефективність трансляційного механізму феромагнітного впорядкування, призводить до

асиметрії концентраційних залежностей намагніченості відносно половинного заповнення зони.

У випадку ненульових температур запропоновано підхід, який дозволяє з використанням числових методів розрахувати намагніченість для системи з довільною незбуреною ГС. Виявлено, що намагніченість з ростом температури може змінюватися як неперервно, так і стрибкоподібно, причому температура та рід переходу у парамагнітний стан, а також феромагнітний концентраційний інтервал визначаються формою ГС та величиною ефективної обмінної взаємодії. Встановлено, що концентраційна залежність температури Кюрі має максимум, положення якого залежить від величини ефективної обмінної взаємодії та форми незбуреної ГС.

У роботі також запропоновано узагальнення підходу до розрахунку електропровідності мотт-габбардівських систем, в яких можлива реалізація феромагнітного впорядкування: спонтанного (за рахунок трансляційного механізму і особливостей форми незбуреної ГС та обмінного механізму) чи під дією зовнішнього магнітного поля. Показано, що поведінка концентраційної залежності провідності обумовлена особливостями відповідних залежностей кінетичної енергії електронів та намагніченості ґратки. Встановлено, що наявність зовнішніх впливів (магнітного поля, тиску) може суттєво модифікувати транспортні характеристики вузькозонного матеріалу. Зміна провідності при зростанні магнітного поля може мати різний характер в залежності від концентрації та форми ГС. Вплив прикладеного зовнішнього тиску на концентраційну залежність провідності зводиться до збільшення величини провідності за рахунок розширення енергетичної зони при деформації ґратки. Характер змін провідності зі зростанням температури є металічним: провідність монотонно спадає при збільшенні температури.

Розраховано ефективні маси носіїв при різних формах незбуреної ГС. Перенормування мас носіїв у досліджуваній системі визначається двома факторами: корельованим переносом електронів та коефіцієнтом кореляційного звуження зони. З'ясовано, що ефективні маси є спін-залежними. Реалізація в системі феромагнітного впорядкування суттєво модифікує поведінку ефективних мас носіїв, поява намагніченості приводить до розщеплення ефективних мас носіїв з різними напрямками спінів, яке визначається особливостями незбуреної ГС та величиною магнітного поля. Встановлено, що корельований перенос практично не впливає на точку спінового розщеплення ефективної маси, однак суттєво змінює її абсолютне значення і може привести до зміни характеру концентраційної залежності.

Автори вдячні ДФФД України за фінансову підтримку досліджень (грант GP/F13/0073).

[1] Изюмов Ю.А., Курмаев Э.З. Материалы с сильными электронными корреляциями // УФН.- 2008.- Т. 178.- С. 25-60.

[2] Дідух Л. Модель вузькозонного матеріалу з електронно-дірковою асиметрією // Журн. фіз. досл. – 1997. – Т.1. – № 2. – С. 241-250.

[3] Крамар О., Скоренький Ю., Дідух Л. Роль форми густини електронних станів у стабілізації феромагнетизму вузькозонного матеріалу // Фізичний збірник НТШ. – 2008. – Т.7. – С.168–181.

МОДЕЛІ БОЗЕ- ТА БОЗЕ-ФЕРМІ-ХАББАРДА ПРИ СКІНЧЕННИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Мисакович Т.С.

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів,
e-mail: mysakovych@icmp.lviv.ua*

Досліджено фазові переходи в моделях Бозе- та Бозе-Фермі-Хаббарда при скінченних температурах. Моделі такого типу можуть застосовуватись для опису оптичних ґраток, іонної провідності, інтеркаляції у кристали та кінетики іонів, адсорбованих на поверхнях кристалів. Слід відзначити, що до цього часу дослідження такого типу моделей в основному обмежувалось розглядом нульової температури.

Одночастинкову функцію Гріна розраховано у наближенні хаотичних фаз (схожому до наближення типу Хаббард-I у випадку ферміонної моделі Хаббарда) з використанням формалізму операторів Хаббарда. Таку функцію Гріна отримано для фази моттівського діелектрика, а також надплинної фази. Встановлено області існування згаданих фаз та побудовано фазові діаграми в площині хімічний потенціал-параметр переносу. Досліджено вплив температури на фазові діаграми та побудовано фазову діаграму температура-хімічний потенціал.

Проаналізовано вплив термічної активації перескоку іонів на фазові переходи (враховано температурну залежність параметра переносу $t=t_0 \exp(-\beta\Delta)$). Показано, що термічна активація веде до звуження області існування надплинної фази. Встановлено, що завдяки термічній активації існує два значення критичної температури, при яких має місце перехід до надплинної фази (при фіксованому значенні хімічного потенціалу).

Для моделі Бозе-Фермі-Хаббарда досліджено випадок жорстких бозонів та використано псевдоспіновий формалізм при описі електрон-іонної взаємодії. Показано, що в системі формується ефективна взаємодія між іонами завдяки псевдоспін-електронній взаємодії. Термодинаміку моделі досліджено в наближенні середнього поля, а сприйнятливність системи розраховано в наближенні типу хаотичних фаз. Встановлено умови переходу першого роду зі стрибками електронної та іонної концентрацій між однорідними фазами та однорідною і модульованою фазою. Виявлено присутність у системі так званої “supersolid” фази, що характеризується одночасно дальнім порядком та відмінним від нуля середнім від операторів народження (знищення) частинок.

ЕКСИТОННИЙ СПЕКТР МАСИВУ ШЕСТИГРАННИХ НАНОТРУБОК З ВРАХУВАННЯМ ЕКСИТОН-ФОНОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ

Маханець О., Довганюк М., Цюпак Н.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
e-mail: ktf@chnu.edu.ua

Інтенсивний розвиток нанотехнологій вже сьогодні дає можливість експериментально створювати нові наносистеми з чіткими геометричними формами. Зокрема, в серії робіт [1-5] автори методом металоорганічної епітаксії експериментально отримали масиви шестигранних нанодротин і нанотрубок та дослідили спектри випромінювання у таких системах.

На основі простої моделі у одній із цих робіт [5] низькоенергетичний пік фотолюмінісценції було ідентифіковано з основним екситонним станом, однак інші особливості експериментального спектру (зокрема положення максимуму високоенергетичного піка та співвідношення між інтенсивностями обох піків) не знайшли теоретичного пояснення.

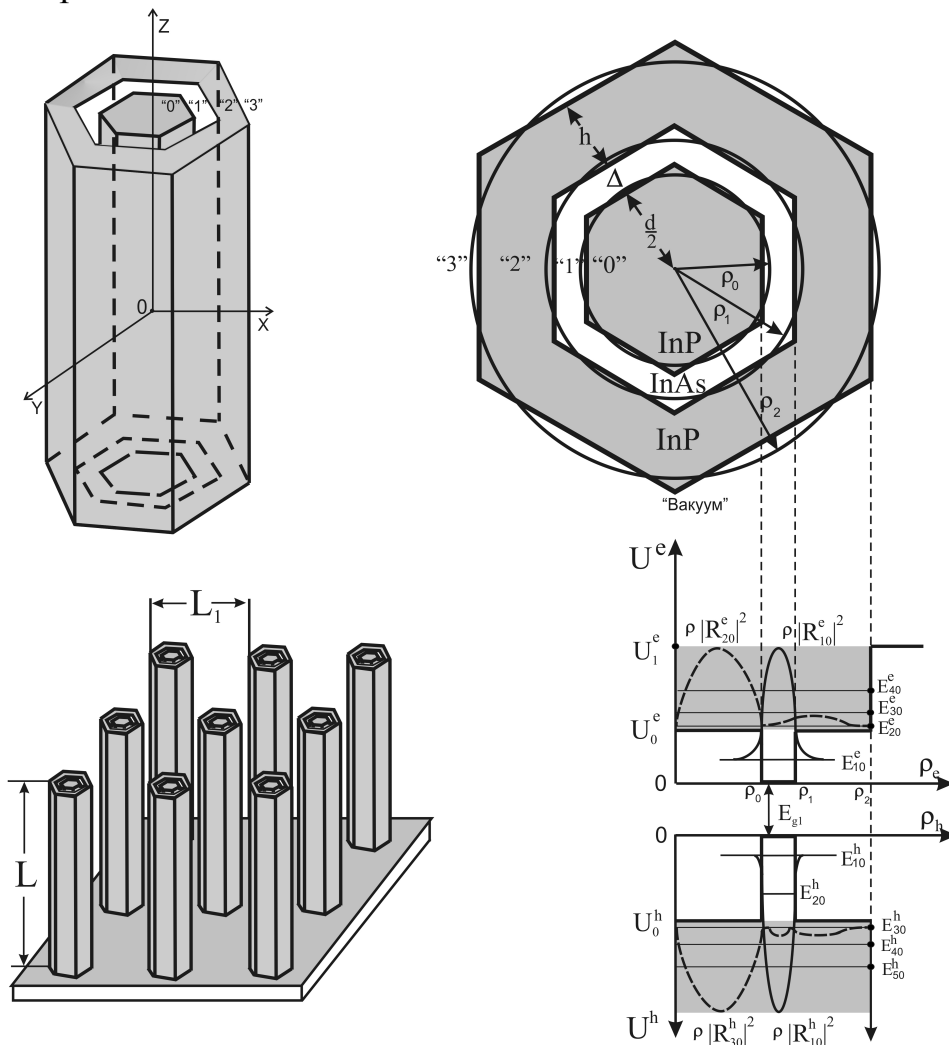


Рис.1. Геометричні та енергетичні схеми системи

Наскільки відомо, послідовної теорії екситонів у кількашарових шестигранних напівпровідникових нанотрубках, тим більше у масивах таких трубок, поки що немає взагалі. То ж відсутня і теорія взаємодії екситона з фононами, як однією з головних дисипативних підсистем будь-якої наносистеми. Тому метою роботи є розробка теорії екситонного спектра масиву шестигранних нанотрубок (рис.1.) з урахуванням взаємодії екситонів з обмеженими та інтерфейсними фононами на основі моделі ефективних мас і прямокутних потенціалів для екситонних електрона і дірки, та моделі діелектричного континууму для поляризаційних фононів

$$\epsilon(\vec{r}) = \begin{cases} \epsilon_0, \\ \epsilon_1, \\ \epsilon_2 = \epsilon_0, \\ \epsilon_3 = 1, \end{cases} \quad \mu^{(e,h)}(\vec{r}) = \begin{cases} \mu_0^{(e,h)}, \\ \mu_1^{(e,h)}, \\ \mu_2^{(e,h)} = \mu_0^{(e,h)}, \\ \mu_3^e = m_0, \end{cases} \quad U^{(e,h)}(\vec{r}) = \begin{cases} U_0^{(e,h)}, & \text{--"0",} \\ U_1^{(e,h)} = 0, & \text{--"1",} \\ U_2^{(e,h)} = U_0^{(e,h)}, & \text{--"2",} \\ U_3^e, U_3^h = \infty, & \text{--"3".} \end{cases} \quad (1)$$

Розвинута теорія дозволяє ідентифікувати положення обох експериментально виявлених піків у шкалі енергій, а також пояснює співвідношення їх інтенсивностей та дає можливість вивчити еволюцію спектральних параметрів екситона зі зміною товщини шестигранної нанотрубки.

У результаті врахування всіх механізмів взаємодії квазічастинок між собою і з фононами спектр екситонних енергій має вигляд

$$E_{n_{\rho}^e m^e}^{n_{\rho}^h m^h} = E_{g_1} + E_{n_{\rho}^e m^e} + E_{n_{\rho}^h m^h} + \delta E_{n_{\rho}^h m^h}^{n_{\rho}^e m^e} + \Delta_{n_{\rho}^e m^e}^{e-L} + \Delta_{n_{\rho}^h m^h}^{h-L} + \Delta_{n_{\rho}^e m^e}^{e-I} + \Delta_{n_{\rho}^h m^h}^{h-I}, \quad (2)$$

де $E_{n_{\rho}^e m^e} \left(E_{n_{\rho}^h m^h} \right)$ – енергії невзаємодіючих електрона та дірки, $\delta E_{n_{\rho}^h m^h}^{n_{\rho}^e m^e}$ – енергія взаємодії електрон-діркової взаємодії, $\Delta_{n_{\rho}^e m^e}^{e-L,I}, \Delta_{n_{\rho}^h m^h}^{h-L,I}$ – зміщення енергетичних рівнів внаслідок взаємодії квазічастинок з фононною підсистемою.

У роботі виконано також оцінку інтенсивностей міжзонних оптичних квантових переходів [6]

$$I_{n_{\rho}^h m^h k^h}^{n_{\rho}^e m^e k^e} \sim \left| \int_0^{\bar{\rho}_2} R_{n_{\rho}^e m^e k^e}^{(I,II)}(\rho) R_{n_{\rho}^h m^h k^h}^{(I,II)}(\rho) \rho d\rho \right|^2. \quad (3)$$

Всі числові розрахунки проводилися для масиву нанотрубок InP/InAs/InP. Установлено, що властивості екситонного спектра шестигранних нанотрубок InAs у середовищі InP, в основному, зумовлені залежностями розмірно квантованих енергій електрона і дірки, що утворюють екситон від геометричних параметрів наносистеми.

Показано, що в масиві експериментально досліджених шестигранних нанотрубок енергії взаємодії електрона і дірки не перевищують 10 MeV, а

зміщення екситонних рівнів за рахунок взаємодії з поляризаційними фононами мають такий же порядок величин, хоча енергія основного стану (E_{10}^{10}) перенормується, в основному, інтерфейсними фононами, а збудженого (E_{30}^{20}) – обмеженими поляризаційними фононами внутрішнього середовища (InP) системи.

Установлено, що як за положенням у шкалі енергій, так і за величинами інтенсивностей квантових переходів, два експериментально виявлені піки у спектрі випромінювання з енергіями E_1 і E_2 відповідають екситонним станам з енергіями E_{10}^{10} і E_{30}^{20} .

- [1] Mohan P. Realization of conductive InAs nanotubes based on lattice-mismatched InP/InAs core-shell nanowires / P. Mohan, J.Motohisa, T.Fukui // Appl.Phys.Lett. – 2006. – V. 88. – p.013110-013115.
- [2] Noborisaka J. Catalyst-free growth of GaAs nanowires by selective-area metalorganic vapor-phase epitaxy / J. Noborisaka, J.Motohisa, T.Fukui //Appl.Phys.Lett. – 2005 . – V. 86. – p. 1222-1228.
- [3] Tomioka K. Crystallographic Structure of InAs Nanowires Studied by Transmission Electron Microscopy / K. Tomioka, J. Motohisa, S. Hara et al.// Jpn. J. Appl. Phys. – 2007. – V.46. - p.1102-1104.
- [4] Hashimoto S. Formation of InP and InGaAs Air-Hole Arrays on InP(111) Substrates by Selective-Area Metal–Organic Vapor Phase Epitaxy / S. Hashimoto, J. Takeda, A. Tarumi et al.// Jpn. J. Appl. Phys. - 2008 . – V.47. - p. 3354-3358.
- [5] Mohan P. Fabrication of InP/InAs/InP core-multishell heterostructure nanowires by selective area metalorganic vapor phase epitaxy / P. Mohan, J. Motohisa, T. Fukui// Appl. Phys. Lett. – 2006. -. V.88. – p. 133105-133118.
- [6] John H. D. The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction / H. D. John // Cambridge University Press, New York. - 1998.- p.438 .

МАГНІТНІ І ТЕПЛОВІ ВЛАСТИВОСТІ СПІН-1/2 ДИСТОРСНОГО РОМБІЧНОГО ЛАНЦЮЖКА ІЗІНГА-ГАББАРДА

Лісний Б.М.

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів,
e-mail: lisnyj@icmp.lviv.ua

Розглядається спін-1/2 дисторсний ромбічний ланцюжок Ізінга-Габбарда у зовнішньому магнітному полі. Примітивна комірка ланцюжка визначається вузлами k і $k + 1$ і містить дві міжвузлові позиції $(k, 1)$ і $(k, 2)$, які разом з вузлами утворюють ромб. У вузлових позиціях примітивної комірки знаходяться ізінгівські спіни, які взаємодіють з сусідами ізінгівськими взаємодіями. Дві міжвузлові позиції в примітивній комірці займають мобільні електрони, по одному електрону на позицію. Мобільні електрони можуть здійснювати квантові перескоки тільки по міжвузлових позиціях у межах комірки. Процес перескоків регулюється правилом Паулі, згідно з яким перескок електронів у комірці можливий, коли їх спіни протилежні. Між двома електронами на одній позиції діє кулонівське відштовхування. Ізінгівські взаємодії вузлових спінів з міжвузловими електронами реалізуються на зв'язках вздовж сторін ромба і мають певну асиметрію відносно ромбічної симетрії. Асиметрія ізінгівських взаємодій полягає у тому, що їх величина на однонаправлених зв'язках однакова, а на різнонаправлених зв'язках різна. Гамільтоніан ланцюжка \mathcal{H} представляється у вигляді суми гамільтоніанів примітивних комірок \mathcal{H}_k . Гамільтоніан комірки \mathcal{H}_k складається з габбардівського гамільтоніана двох електронів, ізінгівської взаємодії електронів з вузловими спінами і енергії спінів комірки у зовнішньому магнітному полі:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_k = & \sum_{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} t(c_{k,1;\sigma}^\dagger c_{k,2;\sigma} + c_{k,2;\sigma}^\dagger c_{k,1;\sigma}) + \sum_{i=1}^2 U n_{k,i;\uparrow} n_{k,i;\downarrow} + \\ & + \mu_k (I_1 S_{k,1} + I_2 S_{k,2}) + \mu_{k+1} (I_2 S_{k,1} + I_1 S_{k,2}) - \\ & - \frac{1}{2} h_a (\mu_k + \mu_{k+1}) - h_b (S_{k,1} + S_{k,2}), \end{aligned}$$

де $c_{k,i;\sigma}^\dagger$ і $c_{k,i;\sigma}$ — оператори народження і знищення електрона зі спіном $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ в міжвузловій позиції (k, i) , $i = 1, 2$, примітивної комірки k ; $n_{k,i;\sigma} = c_{k,i;\sigma}^\dagger c_{k,i;\sigma}$ — оператор числа електронів зі спіном σ в позиції (k, i) ; $S_{k,i} = (n_{k,i;\uparrow} - n_{k,i;\downarrow})/2$ — z -компонента сумарного спіна електронів в позиції (k, i) .

Змінна μ_k позначає z -компоненту спін-1/2 оператора і описує стан ізінгівського спіна на вузлі k . Параметри t і U позначають інтеграл перескоку і однопозиційне кулонівське відштовхування, відповідно. Параметри I_1 і I_2 описують ізінгівську взаємодію вузлових спінів з мобільними електронами вздовж різнонаправлених зв'язків. Параметри h_a і h_b описують дію магнітного поля на ізінгівські спіни і спіни мобільних електронів, відповідно. Така модель без врахування однопозиційного кулонівського відштовхування електронів була запропонована в роботі M.S.S. Pereira, F.A.B.F. de Moura, and M.L. Lyra,

Phys. Rev. B **77**, 024402 (2008) для вивчення ефектів геометричної фрустрації і проміжних плато намагнічення. Основна увага нашого дослідження зосереджена на вивченні впливу кулонівського відштовхування на основний стан і термодинаміку.

Для даного ланцюжка методом декоративно-ітераційного перетворення точно розраховано термодинамічні характеристики: вільну енергію, ентропію, теплоємність, намагніченість ізінгівської і габбардівської підсистем, магнітну сприйнятливість. При числовому аналізі розглянуто випадок антиферромагнітної взаємодії Ізінга ($I_1, I_2 > 0$), коли система геометрично фрустрована. Прийнято $h = h_a = h_b$ і $I_1 \geq I_2$, $\Delta I = I_1 - I_2$. Зроблено перехід до безрозмірних параметрів:

$$\tilde{h} = h / I_1, \quad \Delta \tilde{I} = \Delta I / I_1, \quad \Delta \tilde{I} \in [0, 1], \quad \tilde{t} = t / I_1, \quad \tilde{U} = U / I_1.$$

У даній системі реалізуються такі самі чотири основні стани: насичений парамагнітний стан SPA, феримагнітний стан FRI, ненасичений парамагнітний стан UPA і вузловий антиферромагнітний стан NAF, і вони утворюють такі самі три структурні типи фазової діаграми основного стану в площині $(\Delta \tilde{I}, \tilde{h})$ як це має місце у випадку неврахування кулонівського відштовхування (M.S.S. Pereira, et al., Phys. Rev. B **77**, 024402 (2008)). Вплив кулонівського відштовхування на фазову діаграму основного стану зручно досліджувати при зміні відштовхування разом зі зміною інтенсивності перескоків у режимі

$$\sqrt{\tilde{U}^2 + 16\tilde{t}^2} - \tilde{U} = \text{const},$$

який залишає незмінною енергію стану UPA. У цьому режимі змінюється енергія лише одного з чотирьох основних станів, а саме енергія стану NAF. Вплив відштовхування у цьому режимі послаблюється зміною інтенсивності перескоків і на фазовій діаграмі основного стану проявляється тільки некомпенсований ефект впливу. Показано, що у цьому режимі структура фазової діаграми основного стану не змінюється, а некомпенсований ефект від зростання відштовхування полягає в зміщенні граничних ліній області основного стану NAF. Побудовано (\tilde{t}, \tilde{U}) -діаграму, яка відображає вплив відштовхування \tilde{U} і перескоків \tilde{t} на фазову діаграму основного стану $(\Delta \tilde{I}, \tilde{h})$. Таким чином отримано повний опис властивостей основного стану в залежності від чотирьох параметрів моделі. З'ясовано, що зростання відштовхування змінює фазову діаграму аналогічно як спадання інтенсивності перескоків. Отже, відштовхування послаблює зумовлені перескоками антиферромагнітні кореляції між мобільними електронами.

Вплив кулонівського відштовхування на намагніченість в залежності від поля і температури, магнітну сприйнятливість і теплоємність в залежності від температури досліджено в рамках описаного вище режиму послаблення цього впливу. У процесі намагнічення при нулі температури вплив відштовхування проявляється поблизу границі основного стану NAF. Він полягає у перебудові проміжних плато намагніченості внаслідок зміщення границі основного стану NAF. Згідно до цих змін перебудовуються криві намагнічення при низьких температурах. Також поблизу границі основного стану NAF внаслідок її зміщення під впливом відштовхування зазнають змін низькотемпературні криві намагніченості та магнітної сприйнятливості.

Зростання кулонівського відштовхування зміщує високотемпературні криві намагніченості підсистем: електронної підсистеми у бік збільшення намагніченості, а іонівської підсистеми у бік зменшення намагніченості. Внаслідок цього, високотемпературна крива сумарної намагніченості зміщується у бік збільшення намагніченості. Високотемпературна залежність магнітної сприйнятливості при збільшенні відштовхування також зміщується у бік більших значень. Зростання кулонівського відштовхування зменшує висоту основного максимуму температурної залежності теплоємності, а у випадку основного стану NAF перебудовує ще й низькотемпературний максимум.

Виявлено, що температурна крива теплоємності при відсутності зовнішнього магнітного поля крім основного максимуму може мати ще й два низькотемпературні максимуми. При асиметрії іонівських взаємодій $\Delta\tilde{I}$, що лежить далеко від точки співіснування станів FRI і NAF, є один низькотемпературний максимум, який виникає в результаті складної конкуренції між станами FRI, NAF і UPA: або основний стан FRI конкурує зі станами NAF і UPA, або основний стан NAF конкурує зі станами FRI і UPA. При асиметрії іонівських взаємодій $\Delta\tilde{I}$, що належить околу точки співіснування станів FRI і NAF, цей низькотемпературний максимум розщеплюється на два максимуми. Розташований при найнижчій температурі максимум відповідає конкуренції між станами FRI і NAF, а другий низькотемпературний максимум відповідає конкуренції стану UPA зі станами FRI і NAF.

ПРО ФОРМУ РІВНЯННЯ БАЛАНСУ ДЛЯ ГУСТИНИ КІНЕТИЧНОЇ ЕНЕРГІЇ У КІНЕТИЧНІЙ ВАРІАЦІЙНІЙ ТЕОРІЇ

Гуменюк Й.А.¹, Токарчук М.В.^{1,2}

¹*Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів,*

²*Національний університет “Львівська політехніка”,*

e-mail: josyp@ph.icmp.lviv.ua

У кінетичній теорії густих газів та рідин найбільший прогрес досягнуто для модельних систем, у яких за основу взято кінетичну теорію Енскога для твердих кульок [1,2], а далекосяжна взаємодія враховується наближено. На основі цієї схеми було запропоновано сімейство кінетичних теорій середнього поля для потенціала “тверді кульки + далекосяжний хвіст”,

$$\phi^{\text{hs+t}}(r) = \phi^{\text{hs}}(r) + \phi^{\text{t}}(r), \quad (1)$$

у яких далекосяжне притягання між частинками, характерне для реальних флюїдів, враховується через інтеграл зіткнень типу середнього поля [3–5].

Найпростіша з них, кінетична варіаційна теорія (КВТ), отримується за допомогою максимізації ентропії з деякими в'язями і володіє багатьма цікавими властивостями. Для найпростіших в'язей [5] введено функціонал ентропії і доведено H -теорему [4,6]. В односортному випадку КВТ надає теоретичну базу [3] для стандартної та модифікованої теорій Енскога в рецепті зв'язку діаметра твердої кульки і контактного значення парної функції розподілу з характеристиками реальних флюїдів. Розраховані на її основі коефіцієнти зсувної в'язкості і теплопровідності для простих рідин в області кривої насичення [3,6] показали перевагу КВТ над теоріями, побудованими виключно на моделі тведих кульок. В узагальненні КВТ для сумішей подано аналіз теорії в границі Каца [7].

Хоч КВТ і досі вважається успішною при описі коефіцієнтів переносу густих газів та рідин [8], запропоновані формулювання КВТ містять один недолік, пов'язаний із формою рівняння балансу для густини кінетичної енергії, котре має нестандартний вигляд як в одно- [3], так і в багатосортному випадках [7], не даючи внеску від плавного хвоста ϕ^{t} в тепловий потік кінетичної енергії.

Суть пропозицій КВТ полягає побудові інтеграла зіткнень для потенціала (1) через пошук форми функціональної залежності функції розподілу ансамблю, яка максимізує інформаційну ентропію при певних додаткових умовах (в'язях) [4,5]. Загальний вигляд кінетичного рівняння КВТ для одночастинкових функцій розподілу f_1^i суміші з M компонент має вигляд:

$$[\partial_t + \mathbf{v}_i \cdot \nabla_1] f_1^i(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_i, t) = \sum_{j=1}^M \{ I_{ij}^{\text{E}}[f_1^i, f_1^j] + I_{ij}^{\text{KVT}}[f_1^i, n_j] \}, \quad (2)$$

де $\partial_t = \partial/\partial t$, $\nabla_1 = \partial/\partial \mathbf{r}_1$ – похідні по часу t і координаті \mathbf{r}_1 , \mathbf{v}_i – швидкість частинки сорту i , I_{ij}^{E} – енскогівський інтеграл зіткнень [1,2], а

$I_{ij}^{\text{KVT}}[f_1^i, n_j] = (1/m_i) \int d\mathbf{r}_2 n_j(\mathbf{r}_2, t) g_2^{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) [\nabla_1 \phi_{ij}^{\text{t}}(r_{12})] \cdot \partial/\partial \mathbf{v}_i f_1^i(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_i)$. (3)
– лінійний по ϕ_{ij}^{t} внесок типу середнього поля; m_i , n_j і g_2^{ij} – маса частинки сорту i , густина числа частинок і парна функція розподілу, $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Для

просторової парної функції розподілу g_2^{ij} було запропоновано кілька форм, залежно від в'язі. Зокрема, g_2^{ij} можна замінити [5] на: 1) відповідну функцію $g_2^{ij(\text{hs})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \{n\})$ системи твердих кульок у стані неоднорідної рівноваги з дійсними густинами $n_k(\mathbf{r}, t)$; 2) функцію розподілу $g_2^{ij(\text{hs+t})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \{n\})$, яка характеризує систему з повним потенціалом взаємодії $\phi_{ij}^{\text{hs+t}}(\mathbf{r})$ і також функціонально залежить лише від густин $n_k(\mathbf{r}, t)$; 3) парну функцію розподілу системи з повним потенціалом $g_2^{ij(\text{hs+t})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \{n\}, \beta^p)$ з додатковою залежністю від оберненої потенціальної квазітемператури $\beta^p(\mathbf{r}, t)$, коли функціональна залежність від густин $\{n\}$ і β^p формулюється через кластерний розклад. Ці наближення отримали назви KVT-I, KVT-II і KVT-III, відповідно.

Рівняння балансу для густини кінетичної енергії досить незвичне як в одно- [3], так і в багатосортному [7] випадках. В інтерпретації авторів KVT праві частини рівнянь балансу для густин імпульсу \mathbf{p} та кінетичної енергії e^k , зумовлені $I_{ij}^{\text{E+KVT}}$, мають вигляд:

$$-\nabla \cdot [\mathbf{P}^E + \mathbf{P}^t] \quad \text{та} \quad -\nabla \cdot [\mathbf{P}^E \cdot \mathbf{V} + \mathbf{q}_k^E] - \mathbf{V} \cdot (\nabla \cdot \mathbf{P}^t) + \Delta_{ek}^t, \quad (4)$$

де \mathbf{P}^E і \mathbf{q}_k^E внески у тензор напружень і вектор теплового потоку кінетичної енергії від ϕ_{ij}^{hs} , \mathbf{V} – гідродинамічна швидкість, а $\mathbf{P}^t \equiv \sum_{ij} \langle -\frac{1}{2} \mathbf{R} \nabla_{\mathbf{R}} \phi_{ij}^t(\mathbf{R}) \rangle^{n_2, ij}_{(\mathbf{R}\lambda)12}$ – внесок у тензор напружень від ϕ_{ij}^t . Введене позначення для так званого нелокального усереднення з двочастинковою координатною функцією розподілу $n_2^{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv n_i(\mathbf{r}_1, t) n_j(\mathbf{r}_2, t) g_2^{ij(\text{hs+t})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \{n\})$ означає:

$$\langle \psi \rangle^{n_2, ij}_{(\mathbf{R}\lambda)12} \equiv \int_0^1 d\lambda \int d\mathbf{R} n_2^{ij}(\mathbf{r}_1 - \lambda \mathbf{R}, \mathbf{r}_1 + [1 - \lambda] \mathbf{R}) \psi. \quad (5)$$

Доданок Δ_{ek}^t у загальному випадку має такий вигляд:

$$\Delta_{ek}^t(\mathbf{r}_1, t) = \sum_{ij} [\mathbf{V}_i - \mathbf{V}] \cdot \int d\mathbf{r}_{21} n_2^{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \partial \phi_{ij}^t(\mathbf{r}_{12}) / \partial r_{12} \mathbf{r}_{21} / r_{21}, \quad (6)$$

де $\mathbf{V}_i(\mathbf{r}_1, t)$ – середня швидкість сорту i , $\mathbf{r}_{21} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$.

Порівняно з густиною імпульсу, вираз для e^k у (4) має особливості: 1) внесок з \mathbf{P}^t не має стандартної форми $-\nabla \cdot [\mathbf{P}^t \cdot \mathbf{V}]$, як внесок з \mathbf{P}^E ; 2) нема внеску \mathbf{q}_k^t від I_i^{KVT} у потік тепла; 3) присутній член типу джерело Δ_{ek}^t зникає в односортному випадку [3]. Рівняння балансу для густини внутрішньої кінетичної енергії $\varepsilon^k = e^k - \frac{1}{2} \rho V^2$, де ρ – сумарна густина маси, отримане після виключення конвективних внесків [3,7]

$$\partial_t \varepsilon^k + \nabla \cdot [\mathbf{V} \varepsilon^k + \mathbf{q}_k^{\text{k+E}}] + \mathbf{P}^{\text{k+E}} \cdot \nabla \mathbf{V} = \Delta_{ek}^t, \quad (7)$$

не містить \mathbf{P}^t , ϕ_{ij}^t дає внесок лише в джерело, а в односортному випадку взагалі ніяк не проявляється [3].

До KVT можна прийти за допомогою граничного переходу по потенціалу, стартувавши з кінетичної теорії систем з багатосходиновим потенціалом (БСП) [9,10]. Збільшуючи кількість сходинок і зменшуючи відстані між ними, у границі можна отримати довільний гладкий потенціал наперед заданої форми, а отже – і потенціал KVT (1). Обов'язковою складовою цієї теорії є рівняння балансу для густини потенціальної енергії. Було показано [10], що в зазначеній границі кінетичне рівняння переходить у відповідник KVT, а питання про граничну форму рівнянь для густин кінетичної та потенціальної енергій залишалося без відповіді. Розглянувши такий граничний перехід у

гідродинамічних рівняннях, ми виявили [11], що граничне рівняння для густини кінетичної енергії відрізняється від запропонованого в КВТ.

Спостережені неузгодженості й наведені додаткові аргументи спонукають до детального аналізу і виведення внеску від I_{ij}^{KVT} у загальній формі. Цей внесок у рівняння балансу довільної одночастинкової густини $a(\mathbf{r}_1, t) = \sum_i a_i(\mathbf{r}_1, t)$ можна подати так [12]:

$$\sum_{i,j=1}^M \int d\mathbf{v}_i I_{ij}^{KVT} [f_1^i, n_j] \psi_a^i(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_i, t) = \sum_{i=1}^M \mathbf{W}_a^i(\mathbf{r}_1, t) \cdot \sum_{j=1}^M \int d\mathbf{r}_2 n_j(\mathbf{r}_2, t) g_2^{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) [\nabla_1 \phi_{ij}^t(\mathbf{r}_{12})], \quad (8)$$

де $\psi_a^i(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_i, t)$ – сортова молекулярна характеристика густини a_i , а $\mathbf{W}_a^i(\mathbf{r}_1, t) \equiv \langle (-1/m_i) \partial/\partial \mathbf{v}_i \psi_a^i(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_i, t) \rangle_{\mathbf{v}_i}^{1,i}$ з’являється після інтегрування по \mathbf{v}_i за частинами. Тут ми використали позначення типу $\langle \psi \rangle_{\mathbf{v}}$, яке означає усереднення ψ з функцією f , вказавши в нижньому індексі змінні, по яких проводиться інтегрування. Для густин імпульсу й кінетичної енергії функція \mathbf{W}_a^i дорівнює $n_i(\mathbf{r}_1, t) \mathbf{I}$ та $n_i(\mathbf{r}_1, t) V_i(\mathbf{r}_1, t)$, відповідно (\mathbf{I} – діагональний тензор другого рангу). Права частина виразу (8) симетризується по координатах і сортах за допомогою теореми, доведеної в [12]:

Теорема. Вираз $B(\mathbf{r}_1) = \sum_{ij} \int d\mathbf{r}_2 S_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) N_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, у якому $S_{ji}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = S_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ – симетричні, а $N_{ji}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \neq N_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ – несиметричні частини підінтегральних функцій, представляється у вигляді $B(\mathbf{r}_1) = -\nabla_1 \cdot \mathbf{J}_B(\mathbf{r}_1) + s_B(\mathbf{r}_1)$, де

$$\mathbf{J}_B(\mathbf{r}_1) = \sum_{ij} \langle -1/2 \mathbf{R} N_{ij}(\mathbf{r}_1 - \lambda \mathbf{R}, \mathbf{r}_1 + [1-\lambda] \mathbf{R}) \rangle_{(\mathbf{R}\lambda)12}^{S,ij}, \quad (9)$$

$$s_B(\mathbf{r}_1) = \sum_{ij} \int d\mathbf{r}_2 S_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) 1/2 [N_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + N_{ji}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)]. \quad (10)$$

За допомогою цієї теореми симетризація правої частини (8) дає $-\nabla_1 \cdot \mathbf{J}_a^t + s_a^t$, де

$$\mathbf{J}_a^t(\mathbf{r}_1, t) = \sum_{ij} \langle -1/2 \mathbf{R} \mathbf{R} \mathbf{R}^{-1} \phi_{ij}^{tr}(R) \cdot [\mathbf{W}_a^i(\mathbf{r}_1 - \lambda \mathbf{R}, t) / n_i(\mathbf{r}_1 - \lambda \mathbf{R}, t)] \rangle_{(\mathbf{R}\lambda)12}^{n2,ij}, \quad (11)$$

$$s_a^t(\mathbf{r}_1, t) = \sum_{ij} \langle 1/2 \phi_{ij}^{tr}(\mathbf{r}_{12}) \mathbf{r}_{12}/r_{12} \cdot [\mathbf{W}_a^i(\mathbf{r}_1, t)/n_i(\mathbf{r}_1, t) - \mathbf{W}_a^j(\mathbf{r}_2, t)/n_j(\mathbf{r}_2, t)] \rangle_{r2}^{n2,ij}. \quad (12)$$

Одержані вирази справедливі для довільної функціональної форми $g_2^{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$, зокрема, якщо g_2^{ij} залежить функціонально лише від густин $\{n\}$, то отримуються результати КВТ-I чи КВТ-II. Вирази для внесків до потоків і джерел від ϕ_{ij}^t , що входять у рівняння балансу для густин імпульсу й кінетичної енергії, мають вигляд:

$$\mathbf{J}_p^t = \sum_{ij} \langle -1/2 \mathbf{R} \mathbf{R} \mathbf{R}^{-1} \phi_{ij}^{tr}(R) \rangle_{(\mathbf{R}\lambda)12}^{n2,ij}, \quad \mathbf{s}_p^t(\mathbf{r}_1, t) = \mathbf{0}, \quad (13)$$

$$\mathbf{J}_{ek}^t = \sum_{ij} \langle -1/2 \mathbf{R} \mathbf{R} \mathbf{R}^{-1} \phi_{ij}^{tr}(R) \cdot V_i(\mathbf{r}_1 - \lambda \mathbf{R}) \rangle_{(\mathbf{R}\lambda)12}^{n2,ij}, \quad (14)$$

$$s_{ek}^t = \sum_{ij} \langle 1/2 \phi_{ij}^{tr}(\mathbf{r}_{12}) \mathbf{r}_{12}/r_{12} \cdot [V_i(\mathbf{r}_1) - V_j(\mathbf{r}_2)] \rangle_{r2}^{n2,ij}. \quad (15)$$

Виділяючи у \mathbf{J}_{ek}^t внесок від конвективного руху $\mathbf{J}_{ek}^t = \mathbf{J}_p^t \cdot \mathbf{V} + \mathbf{q}_k^t$, одержуємо вираз для внеску в потік тепла від I_i^{KVT} , зумовлений далекосяжною частиною потенціала ϕ_{ij}^t :

$$\mathbf{q}_k^t = \sum_{ij} \langle -1/2 \mathbf{R} \mathbf{R} \mathbf{R}^{-1} \phi_{ij}^{tr}(R) \cdot [V_i(\mathbf{r}_1 - \lambda \mathbf{R}) - V(\mathbf{r}_1)] \rangle_{(\mathbf{R}\lambda)12}^{n2,ij}. \quad (16)$$

Внесок у джерело s_{ek}^t описує обмінні процеси між густинами кінетичної і потенціальної енергій. Обидва ці внески присутні як в односторньому, так і багатосторньому випадках і мають прозору фізичну інтерпретацію, на відміну від дифузійного залишку типу Δ_{ek}^t (6). Більше того, в жодній з робіт по кінетичній теорії середнього поля не згадується про обмін між кінетичною і потенціальною енергіями, приписуючи таку характерну особливість лише кінетичним теоріям систем з розривними потенціалами [42].

Хоч обидва кінцеві результати

$$-\nabla_1 \cdot [\mathbf{P}^t \cdot \mathbf{V} + \mathbf{q}_k^t] + s_{ek}^t \quad \text{і} \quad -\mathbf{V} \cdot (\nabla \cdot \mathbf{P}^t) + \Delta_{ek}^t$$

рівні між собою, бо виводяться з того ж самого початкового виразу, однак питання, яке ми розглянули, не є лише питанням форми, оскільки член \mathbf{q}_k^t може давати свій внесок у коефіцієнт теплопровідності. Ми перевірили це на прикладі односортної системи і показали, що насправді такий внесок дорівнює нулю [12]. Проте є можливість ненульових внесків від \mathbf{q}_k^t , які мають вищі порядки по градієнтах. Нижче з'ясовано, що потік потенціальної енергії в рамках КВТ теж не дає внеску в потік тепла. Це означає, що всі числові результати КВТ для коефіцієнта теплопровідності односортних систем, отримані на основі нестандартного запису рівняння балансу для густини кінетичної енергії, правильні. Однак вони мають стосуватися рівняння переносу для густини *повної* внутрішньої енергії, а не кінетичної. Для сумішей ситуація цікавіша і введена модифікація може впливати на числові значення як коефіцієнта теплопровідності, так і коефіцієнта термодифузії [12].

Далі розгляньмо питання про те, яким чином густина потенціальної енергії взаємодії $e^p(\mathbf{r}_1, t) = \langle \frac{1}{2} \phi_{ij}^t(r_{12}) \rangle_{v_{ij}r_2}^2$ має входити в кінетичну варіаційну теорію на прикладі односортної системи. У випадку потенціала (1), лише плавний хвіст дає внесок в e^p і рівняння балансу слід виводити з другого рівняння ланцюжка ББГКІ для цього потенціала, а ту чи іншу функціональну гіпотезу використовувати у кінцевому рівнянні. Це рівняння балансу має вигляд [11,12]:

$$\partial_t e^p + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{ep}^k = s_{ep}^r, \quad (17)$$

де $\mathbf{J}_{ep}^k(\mathbf{r}_1, t) \equiv \langle \frac{1}{2} \mathbf{v}_1 \phi^t(r_{12}) \rangle_{v_1 x_2}^2$, $s_{ep}^r(\mathbf{r}_1, t) \equiv \langle \frac{1}{2} \mathbf{v}_{12} \cdot \mathbf{r}_{12} / r_{12} \phi^t(r_{12}) \rangle_{v_1 x_2}^2$ – кінетичний потік та джерело потенціальної енергії (зумовлене залежністю молекулярної характеристики густини e^p від r_{12}). Обидві ці величини виражаються через f_2 , а саме рівняння (17) точне.

Для всіх трох варіантів КВТ потік стає суто конвективним $\mathbf{J}_{ep}^k = \mathbf{V} e^p$ і не дає внеску в повний потік тепла, а отже і в коефіцієнт теплопровідності. У джерелі, при цьому, можна проінтегрувати по швидкостях

$$s_{ep}^r \equiv \langle \frac{1}{2} [\mathbf{V}(\mathbf{r}_1) - \mathbf{V}(\mathbf{r}_2)] \cdot \mathbf{r}_{12} / r_{12} \phi^t(r_{12}) \rangle_{r_1}^2.$$

Порівнюючи з результатом (15), записаним для односортного випадку, бачимо, що джерела кінетичної та потенціальної енергій *компенсують* одне одного: $s_{ep}^r = -s_{ek}^t$. Як наслідок, рівняння для густини повної енергії не має джерела у правій частині

$$\partial_t e^{k+p} + \nabla \cdot [\mathbf{J}_{ek}^k + \mathbf{J}_{ek}^E + \mathbf{J}_{ek}^{\phi,t} + \mathbf{J}_{ep}^k] = 0, \quad (18)$$

як і належить густині збережуваної величини, а для густини внутрішньої енергії воно набуває стандартного вигляду:

$$\partial_t e^{k+p} + \nabla \cdot [\mathbf{V} e^{k+p} + \mathbf{q}^{k+E+t}] = -\mathbf{P}^{k+E+t} : \nabla \mathbf{V}. \quad (19)$$

Проаналізувавши виведення рівнянь балансу КВТ, ми запропонували модифікацію рівняння балансу для густини кінетичної енергії. Отримані результати узгоджуються з граничними рівняннями кінетичної теорії систем з багатосходковим потенціалом та зі стандартним виглядом рівнянь балансу в термінах потоку й джерела. Особливість модифікації, порівняно з оригінальним

формулюванням КВТ – це дотримання закону збереження енергії та поява внеску в потік тепла від далекосяжної частини потенціала. Проте завдяки нехтуванню парними кореляціями у просторі швидкостей, характерному для КВТ, цей внесок не впливає на розрахунки коефіцієнта теплопровідності КВТ для односортих систем [3,8], але проявляється у другому і вищих порядках по градієнтах та в першому порядку по градієнтах для сумішей.

- [1] Van Beijeren H., Ernst M.H. // *Physica (Utrecht)*, 1973, **68**, 437.
- [2] Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. Москва, Мир, 1976.
- [3] Karkheck J., Stell G. // *J. Chem. Phys.*, 1981, **75**, 1475.
- [4] Karkheck J., Stell G. // *Phys. Rev. A*, 1982, **25**, 3302.
- [5] Stell G., Karkheck J., van Beijeren H. // *J. Chem. Phys.*, 1983, **79**, 3166.
- [6] Karkheck J., Stell G., Xu J. // *J. Chem. Phys.*, 1988, **89**, 5829.
- [7] Karkheck J., Martina E., Stell G. // *Phys. Rev. A*, 1982, **25**, 3328.
- [8] Dyer K.M., Pettitt B.M., Stell G. // *J. Chem. Phys.*, 2007, **126**, 034502.
- [9] Токарчук М.В., Омелян І.П. // *Укр. фіз. журн.*, 1990, **35**, 1255.
- [10] Токарчук М.В., Омелян І.П. / Препринт ИТФ АН УССР, ИТФ-87-152Р, 1987, 36 с.
- [11] Humenyuk Y.A., Tokarchuk M.V. // *Ukr. J. Phys.*, to appear.
- [12] Гуменюк Й.А., Токарчук М.В. / Препринт ІФКС НАН України, ІСМР-08-13U, Львів, 2008, 35 с.

ВПЛИВ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО ПОЛЯ НА НАНОСТРУКТУРНІ СИСТЕМИ ТА ДИСПЕРСНІ СЕРЕДОВИЩА

Куницька Л.Ю.

Авіаційний університет України, м. Київ,
e-mail: luibov2511@mail.ru

На сьогодні в науці та техніці сформулювалися нові перспективні напрямки з префіксом нано- (нанofізика, нанохімія, нанoeлектроніка, нанотехнології, тощо). Розвиток цих напрямів стимулює прогрес експериментальних і теоретичних досліджень як для пояснення вже відомих фактів, так і для прогнозування нових. При цьому особливий інтерес викликають ефекти взаємодії електромагнітного випромінення з нанорозмірними об'єктами. У порівнянні з масивними тілами в наносистемах ідентичного хімічного складу змінюються електродинамічні та структурні параметри, теплові, оптичні, електричні та магнітні властивості.

Мета роботи - розробка методів розрахунку параметрів розсіяння та поглинання електромагнітного випромінення при взаємодії з наночастинками різної природи, матричними дисперсними системами з нановключеннями, дослідженню фізичних процесів, що виникають при формуванні нанокристалічних та періодичних наноструктур, індукованих на поверхні твердих тіл під дією лазерного опромінення.

Предметом дослідження є закономірності електродинамічного відгуку системи наночастинок поблизу поверхні твердих тіл та матричних дисперсних систем на їх основі на зовнішнє електромагнітне випромінення; особливості фізичних процесів у наноструктурних системах, полімерних нанокомпозитах та поверхневих шарах матеріалів різної природи при взаємодії з електромагнітним випроміненням. Об'єктом дослідження були фізичні ефекти, що виникають при взаємодії електромагнітного випромінення з нанорозмірними структурами та поверхневими шарами матеріалів різної природи.

Для систем «кульова наночастинка над підкладкою» встановлено, що

- у зовнішньому електростатичному полі напруженістю E мають місце зміщення та розщеплення резонансної частоти поверхневого збудження наночастинки, які залежать від напрямку поля E ;
- дипольна взаємодія наночастинки з підкладкою зумовлює розщеплення та зміщення одночастинкового резонансу;
- врахування вищих мультиполів призводить до подальшого зміщення максимуму поглинання та збільшення його інтенсивності;
- форма спектрів поглинання суттєво змінюється в залежності від розмірів та природи наночастинок, характеру їх розташування та відстані від підкладки.

Показано, що наявність діелектричної оболонки на кульовій металевій наночастинці призводить до пропорційного товщині оболонки зсуву частоти поверхневого плазмону.

Встановлено ефект розщеплення одночастинкового резонансу поверхневого плазмону за рахунок шарватості наночастинок або міжчастинкової взаємодії.

Розраховані частотні залежності ефективної діелектричної проникності для матричних дисперсних систем з кульовими включеннями різної природи. Для випадку металевих включень показано суттєву залежність частоти поверхневого плазмону від ступеня заповнення $f=v/v_0$ (v – об’єм, зайнятий включеннями, v_0 – повний об’єм системи) з урахуванням парної диполь-дипольної взаємодії між включеннями.

Показано, що розташування та симетрія кластерів золота при напиленні на поверхню електретного темплату на основі фоточутливого карбазолвмісного наноконпозиційного полімеру задаються топологією світлового поля голограми, використаного для формування темплату.

Визначено просторово-часовий розподіл полів температури та швидкості її зміни у приповерхневих шарах при дії системи періодичних теплових джерел, що дозволяє проводити оптимізацію режимів лазерного опромінення матеріалів різної природи.

Практичне значення одержаних результатів визначається можливістю використання одержаних результатів при розробці принципів створення нових багатофункціональних матеріалів з наперед заданими електродинамічними властивостями. Такі матеріали знаходять застосування в наноелектроніці, динамічній голографії, технології напівпровідникового виробництва, проектуванні оптичних елементів (фільтрів, поляризаторів тощо), сонячних батареях, фотоніці, медицині та біології. Теоретичне вивчення різноманітних процесів взаємодії наночастинок між собою та з поверхнею розділу фаз відіграє важливу роль при поясненні процесів зсідання колоїдів, адсорбції наночастинок поверхнею твердого тіла або мембраною клітини і відкриває можливість керування цими процесами.

[1] Шпак А.П. Періодичні структури, індуковані на поверхні твердих тіл інтерференцією лазерних жмугів. Теплові ефекти / Шпак А.П., Гречко Л.Г., Куницька Л.Ю., Лерман Л.Б., Семчук О.Ю. // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. – 2007. – Т. 5, № 3. – С. 683-718.

[2] Гречко Л.Г. Поглинання електромагнетного випромінення в матрично-дисперсних системах з багат шаровими кульстими включеннями / Гречко Л.Г., Грищук О.Ю., Куницька Л.Ю., Лерман Л.Б., Лющенко М.О. // Металлофиз. новейшие технол. – 2008. – Т.30, № 6. – С. 789-804.

[3] Гречко Л.Г. Поверхневі моди малих частинок (НЧ) та матричних дисперсних систем (МДС) на їх основі / Гречко Л.Г., Грищук О.Ю., Куницька Л.Ю. // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. – 2008. – Т. 6, № 3. – С.775-784.

[4] Куницька Л.Ю. Формування поверхневих періодичних наноструктур темплатним методом / Куницька Л.Ю., Гринько Д.О., Андеев Е.О., Барабаш Ю.М., Заболотний М.А., Барабаш М.Ю., Матяш І.Е. // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. – 2009. – Т. 7, № 1. – С. 1001-1009.

КОНФІГУРАЦІЙНІ ПРЕДСТАВЛЕННЯ МОДЕЛЕЙ НАНОСТРУКТУРНИХ НИЗЬКОВИМІРНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СИСТЕМ

Скоренький Ю.Л.¹, Крамар О.І.¹, Дрогобицький Ю.В.²

¹*Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,*

²*Тернопільський національний педагогічний університет ім. В.Гнатюка*

e-mail: skorenkyy@tstu.edu.ua

В даному дослідженні сформульовано моделі електронної підсистеми легованих фулеридів та систем з андерсон-габбардівськими центрами. Ці результати узагальнюють відповідні моделі, використані іншими дослідниками, врахуванням орбітального виродження енергетичних рівнів та корельованого переносу електронів. Для сформульованих моделей побудовані конфігураційні представлення, які дозволяють виокремити процеси, які формують квазічастинкові підзони, виявити механізми локалізації електронів та стабілізації різних типів магнітного впорядкування. Незважаючи на певну громіздкість виразів, конфігураційне представлення має ряд переваг: воно дозволяє у явному вигляді розділити доданки гамільтоніана, які описують процеси, що формують квазічастинкові підзони, та процеси гібридизації цих підзон, отримати діагональний вигляд доданків, які описують кулонівські одновузлові взаємодії (коректне врахування яких є принципово важливим), класифікувати процеси корельованого переносу електронів та відповідні їм звуження квазічастинкових підзон.

Електричні, оптичні та механічні властивості фулеридів [1, 2] та систем з квантовими точками [3, 4] вказують на багатий фізичний зміст явищ, які в них відбуваються, та на значні перспективи використання цих матеріалів у електроніці та інших галузях науки і техніки. Зокрема, легування твердого фулериду C_{60} невеликою кількістю лужного металу приводить до утворення матеріалу з металічним типом провідності, який при низьких температурах переходить в надпровідний стан (T_c від 2,5 К для сполуки Na_2KC_{60} до 33 К для сполуки $RbCs_2C_{60}$). Лише A_3C_{60} є металічним, тоді як AC_{60} , A_2C_{60} , та A_4C_{60} – діелектриками [5]. Різні фази цих сполук утворюються при зміні температури, концентрації лужного металу, параметра ґратки та структури ґратки. Зокрема, металічна, діелектрична і надпровідна фази отримані при різному заповненні n (n може змінюватися від 0 до 6) найвищої незаповненої молекулярної орбіталі (LUMO) в C_{60} . Електрон-електронна взаємодія в C_{60} описується двома основними параметрами: внутрішньомолекулярного кулонівського відштовхування U та обмінної взаємодії J . У фулеридях конкуренція між кулонівською взаємодією електронів на одному вузлі та процесами делокалізації, пов'язаними з трансляційним рухом електронів (визначають ширину зони), обумовлює реалізацію діелектричного чи металічного стану [6]. Для детального теоретичного дослідження електричних (зокрема, переходу метал-діелектрик) та магнітних властивостей сполук типу легованих фулеридів в моделі необхідно адекватно враховувати орбітальне виродження

енергетичних рівнів, сильну кулонівську кореляцію а також корельований перенос електронів у вузьких енергетичних зонах.

В трикратно виродженій моделі кожен із вузлів ґратки може перебувати у одному із 64 станів. Гамільтоніан моделі в конфігураційному представленні має вигляд: $H = H_0 + T$, де H_0 позначає атомну частину гамільтоніану, а трансляційна частина гамільтоніану може бути подана у вигляді $T = \sum_{n,m} T_{nm}$, де

n, m нумерують базисні стани. До гамільтоніанів T_{nm} входять процеси, що формують енергетичні підзони (аналоги габбардівських підзон), та процеси гібридизації цих підзон. Переходам в різних підзонах T_{nm} чи між різними підзонами T_{nm} ($n \neq m$) відповідають різні інтеграли переносу t_{ij}^{nm} . У виродженій моделі, в зв'язку з більшою кількістю можливих електронних конфігурацій вузла та наявністю додаткових механізмів корельованого переносу, можна виділити більше, порівняно з невиродженою моделлю, різних за величиною інтегралів переносу електрона з вузла на вузол. Відповідно підзони, що формуються внаслідок переходів електрона, матимуть різні ширини. Взаємне розташування та перекриття цих підзон залежить від співвідношень між значеннями параметрів кулонівської взаємодії, гундівської обмінної взаємодії та ширинами підзон. При цілих значеннях концентрації електронів n від 1 до 5 в системі може відбуватися перехід метал-діелектрик.

Енергетичний спектр моделі, адекватної електронній підсистемі $A_x C_{60}$ розраховано, використовуючи формалізм функцій Гріна. Для утворення замкнутої системи рівнянь використано процедуру проектування, подібну до використаної в роботі [7]. Енергетичний спектр є залежним від концентрації двократно зайнятих станів. Аналіз залежності ширини енергетичної щілини від параметра кулонівської взаємодії та параметрів корельованого переносу показує, що корельований перенос суттєво впливає на електричні характеристики вузькозонного матеріалу із трикратним орбітальним виродженням енергетичних рівнів. Як заселеність вузлів, які беруть участь у процесі трансляційного руху електронів (їх вплив спричиняє корельований перенос першого роду), так і заселеність сусідніх до них вузлів (корельований перенос другого роду), можуть привести до появи енергетичної щілини у спектрі – стабілізації діелектричного стану. Однак, енергетична щілина виникає при відносно значній зміні параметрів корельованого переносу, яка не може реалізуватися в певній сполуці лише при зміні зовнішніх умов. Настільки суттєва зміна параметрів може бути отримана лише при легуванні. Інша картина спостерігається при зміні параметра одновузлової кулонівської взаємодії – при зростанні $(U-3J)/w$ вище певного критичного значення (залежного від величин параметрів корельованого переносу) виникає енергетична щілина, відбувається перехід метал – діелектрик.

Для опису систем із квантовими точками сформульовано модельний гамільтоніан андерсон-габбардівського матеріалу, який узагальнює моделі, запропоновані у роботах [8, 9], врахуванням особливостей кореляційних ефектів у підсистемі „локалізованих” електронів, підсистемі „зонних” електронів та гібридизації цих підсистем:

$$H = H_0 + H_1 + H_2, \quad (1)$$

де

$$H_0 = E \sum_i (X_i^\uparrow + X_i^\downarrow + 2X_i^2) + U \sum_i X_i^2 + \sum_{k\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{k\sigma}^+ c_{\vec{k}\sigma}, \quad (2)$$

$$H_1 = H_a + H_b, \quad (3)$$

$$H_2 = H_c + H_d + H_e, \quad (4)$$

при цьому

$$H_a = \sum_{i\vec{k}\sigma} (\eta_\sigma V(\vec{k}i) c_{k\sigma}^+ X_i^{0\sigma} + e.c.), \quad (5)$$

$$H_b = \sum_{i\vec{k}\sigma} (V(\vec{k}i) c_{k\sigma}^+ X_i^{\sigma 2} + e.c.), \quad (6)$$

$$H_c = 2 \sum_{ij\vec{k}} (V(ij\vec{k}, -\vec{k}) X_i^{\uparrow 0} X_j^{\downarrow 0} c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} + e.c.), \quad (7)$$

$$H_c = 2 \sum_{ij\vec{k}} (V(ij\vec{k}, -\vec{k}) X_i^{2\uparrow} X_j^{2\downarrow} c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} + e.c.), \quad (8)$$

$$H_e = 2 \sum_{ij\vec{k}} (V(ij\vec{k}, -\vec{k}) (X_i^{\downarrow 0} X_j^{2\downarrow} c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} - X_i^{2\uparrow} X_j^{\uparrow 0} c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}) + e.c.), \quad (9)$$

тут $\varepsilon_{\vec{k}}$ - енергія електрона провідності із квазіімпульсом \vec{k} , $V(i\vec{k})$ і $V(ij\vec{k}, -\vec{k})$ – матричні елементи, які описують відповідно “одноелектронну” і “двоелектронну” гібридизацію “зонних” і “локалізованих” електронів. X_i^{kl} – оператори описують переходи між станами вузлів локалізованої підсистеми, $c_{k\sigma}^+$, $c_{\vec{k}\sigma}$ - оператори народження і знищення електронів провідності зі спіном σ і квазіімпульсом \vec{k} . Якщо розглядається перехідний 3d-метал, то локалізована підсистема - 3d-електрони, а зонна підсистема – s-p-електрони (як і для розбавлених сплавів); для випадку, який реалізується в оксидах, локалізована підсистема – також 3d-електрони, а енергетична зона формується як 3d-підсистемою, так і 2p-електронами кисневої підсистеми та, можливо, 4s-електронами катіонної підсистеми; у сполуках на основі рідкоземельних елементів локалізована підсистема – це f-електрони, а зонні стани формуються s-p-d-електронами). До таких речовин можуть бути віднесені сполуки типу SmS, тверді розчини типу Sm_{1-x}ReS (Re=Ga, Yb, Gd, Nd), системи з важкими ферміонами (CeAl₃, CeCu₂Si, CeCu₆, UPt, UBe₁₃ та інші, див. у цьому зв’язку огляд [10]). Прикладом низьковимірної системи з важкими ферміонами може бути нещодавно синтезований методом молекулярної епітаксії шаруватий матеріал CeIn₃, в якому можливі квантові переходи [11].

Доцільність представлення гамільтоніанів андерсонівського типу через X_i^{kl} -оператори зумовлена зручністю математичного опрацювання таких

гамільтоніанів, зокрема, в методі функцій Гріна. На даний час, в рамках конфігураційних представлень вузькозонних гамільтоніанів розвинуто ряд методів [7, 12] розрахунку одноелектронного енергетичного спектру, які показали свою ефективність при дослідженнях електричних та магнітних властивостей вузькозонних сполук перехідних металів.

- [1] А.В. Елецкий, Б.М. Смирнов // Усп. физ. наук , 1995, **165**, 977.
- [2] N. Manini, E. Tosatti // E-print cond-mat/0602134.
- [3] Ping Zhang et al // Phys. Rev. Lett., 2002, **89**, 286803.
- [4] L. Dias da Silva et al // Phys. Rev. B, 2008, **78**, 153304.
- [5] D.M. Poirier et al // Phys. Rev. B, 1993, **47**, 9870.
- [6] O. Gunnarsson, E. Koch and R.M. Martin // Phys. Rev. B., 1997, **56**, 1146.
- [7] Л. Дідух // Журн. фіз. досл., 1997, **1**, 241.
- [8] Л.Д. Дидух, И.В. Стасюк // Физика металлов и металловедение, 1968, **26**, 582.
- [9] Л.Д. Дидух, В.Д. Дидух, И.В. Стасюк // Укр. физ. журн., 1975, **20**, 97.
- [10] Ю.А. Изюмов, Э.З. Курмаев // Усп. физ. наук, 2008, **178**, 25.
- [11] H. Shishido et al // Science, 2010, **327**, 980.
- [12] Л. Дідух // Вісник ТДТУ ім. І.Пулюя, 2009, 14, 180.

ПАРАМЕТРИЧНА ІДЕНТИФІКАЦІЯ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ МАСОПЕРЕНОСУ В НЕОДНОРІДНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Михалик Д.М.

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

e-mail: d.mykhalyk@gmail.com

Молекулярний транспорт в неоднорідному нанопористому середовищі викликає два процеси: дифузію в макропорах, завдяки простору між кристалітами і дифузію в системі мікро- і нанопор в середині кристалітів. Для визначення внеску кожного з цих процесів в загальний процес дифузії, необхідно знати значення певних кінетичних параметрів процесу, таких як концентрації в міжчастинковому просторі та в частинці, коефіцієнти дифузії, розміри цеоліт ложа, адсорбційні ізотерми та інші.

Математична модель кінетики дифузії газу в середовищі, яке, як ми припускаємо, є різномірним і нанопористим, визначають розв'язки системи диференціальних рівнянь вигляду:

$$\varepsilon_{interk} \frac{\partial c_k}{\partial t} = D_{interk} \cdot \varepsilon_{interk} \frac{\partial^2 c_k}{\partial z^2} - \frac{3(1 - \varepsilon_{interk})}{R} \cdot (D_{int ra_k} \frac{\partial q_k}{\partial r})|_{r=R} \quad (1)$$

$$\frac{\partial q_k}{\partial t} = D_{int ra_k} \left(\frac{\partial^2 q_k}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q_k}{\partial r} \right) \quad (2)$$

в області $I_n = \left\{ t > 0, r \in (0, R), z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k); l_0 = 0; l_{n+1} \equiv l < \infty \right\}$,

які описують баланс маси в макропорах (c_k) і мікропорах (q_k) для кожного k -го шару неоднорідного середовища

при початкових умовах

$$c_k(t=0, z) = 0, \quad q_k(t=0, r, z) = 0, \quad (3)$$

крайових умовах

$$c_{n+1}(t, z=l) = c_{\infty n+1}, \quad q_k(t, r=R, z) = K_k \cdot c_k(z, t); \quad (4)$$

$$\frac{\partial c_l}{\partial z}(t, z=0) = 0, \quad \frac{\partial q_k}{\partial r}(t, r=0, z) = 0, \quad (5)$$

та з системою умов інтерфейсних взаємодій по координаті z :

$$\left[c_k(t, z) - c_{k+1}(t, z) \right]_{z=l_k} = 0; \quad \left[\frac{\partial}{\partial z} c_k(t, z) - \frac{\partial}{\partial z} c_{k+1}(t, z) \right]_{z=l_k} = 0, \quad k = \overline{1, n} \quad (6)$$

Розв'язок моделі (1) – (6) отримуємо, апроксимувавши вихідну задачу за схемою Кранка-Ніколсона та розв'язавши отриману систему алгебраїчних рівнянь застосовуючи метод прогонки.

Отримавши, таким чином, чисельний розв'язок моделі масопереносу в неоднорідному нанопористому середовищі та розробивши на його основі

комплекс програмного забезпечення на мові Java, вдалося побудувати просторово-часові залежності кінетичних параметрів процесу масопереносу.

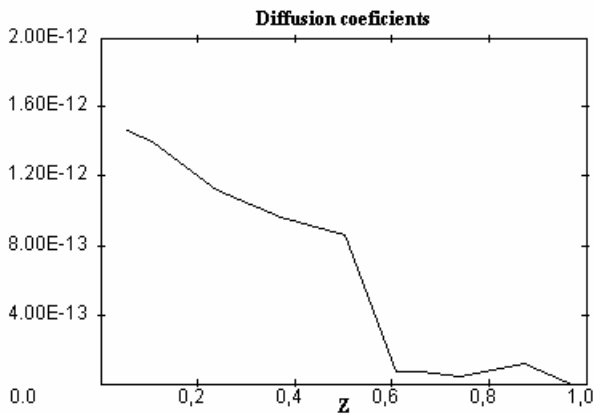


Рис. 1 – Розподіл коефіцієнту дифузії в макропорах D_{inter} .

Зокрема, використавши експериментальні дані по кінетиці адсорбції бензолу в цеоліті, здійснено параметричну ідентифікацію коефіцієнтів дифузії в макропорах середовища D_{inter} уздовж координати z неоднорідного шару каталітичного середовища.

Далі, використовуючи профілі ідентифікованих коефіцієнтів дифузії, здійснено процедуру визначення часово-просторових розподілів концентрацій для міжчастинкового простору $C(t, Z)$ та простору в частинці $Q(t, X, Z)$.

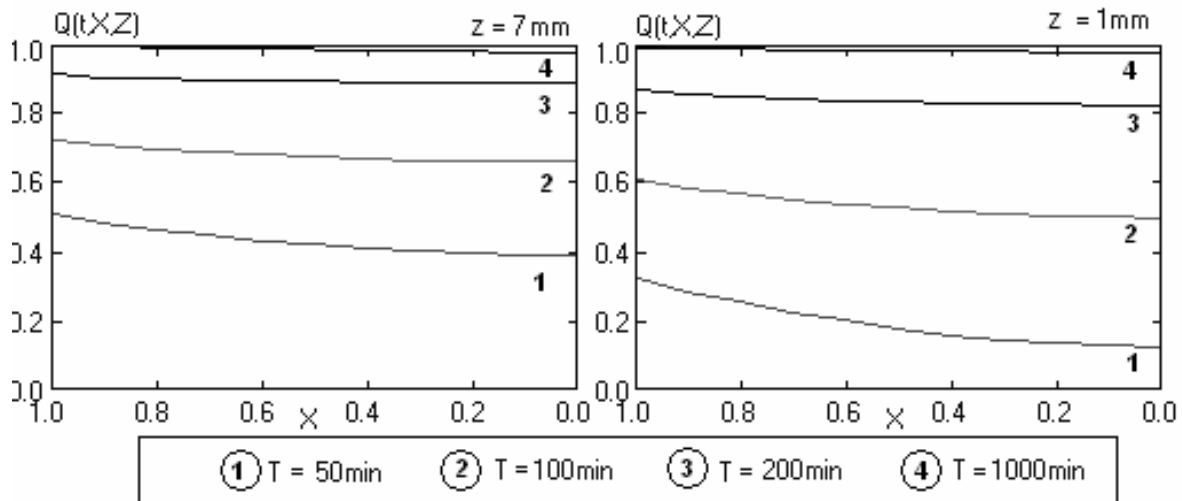


Рис. 2 - Розподіли концентрації газу для простору в частинці неоднорідного середовища для різних положень частинки в цеоліті z і для різних моментів часу t

Отриманий чисельний розв'язок представленої моделі дворівневого масопереносу в неоднорідному нанопористому середовищі та розроблене на її основі програмне забезпечення дозволило здійснити параметричну ідентифікацію ряду кінетичних параметрів процесу дифузійного масопереносу, зокрема визначити значення коефіцієнтів дифузії для макро та нанопросторів середовища, а також змодельовати розподіли концентраційних градієнтів і інших параметрів процесу дифузії.

КОМП’ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ВНЕСЕННЯ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК В МАТЕРІАЛ ПІД ДІЄЮ ЛАЗЕРНИХ УДАРНИХ ХВИЛЬ.

Маньовська О.А.

Тернопільський національний університет імені Івана Пулюя,

e-mail: manjovska@gmail.com

Особливістю обробки матеріалів наносекундним лазерним імпульсом є виникнення в матеріалі ударної хвилі. Розвиток лазерної ударно-хвильової технології як методу обробки матеріалів викликає необхідність вивчення процесів, що відбуваються в матеріалах, коли опромінення, з метою підсилення тиску ударної хвилі, здійснюється в прозорому конденсованому середовищі (ПКС).

Ударну хвилю, що виникає в матеріалі при дії на нього потужного лазерного випромінення, називають лазерною ударною хвилею, під якою розуміють різке стрибкоподібне збільшення тиску в опромінюваному матеріалі, який поширюється в ньому з надзвуковою швидкістю та стійкий по відношенню до малих збурень свого профілю.

Експерименти по внесенню вуглецевих нанотрубок в матеріал під дією лазерних ударних хвиль проводились нами разом з Інститутом металофізики ім. Г.В.Курдюмова НАН України показали підвищення термоелектронної емісії нанотрубок.

Дана робота присвячена комп’ютерному моделюванню процесу внесення вуглецевих нанотрубок в матеріал під дією лазерних ударних хвиль, а саме розрахунків температурних полів в матеріалах, які зазнали опромінення потужними лазерними імпульсами.

Процес внесення вуглецевих нанотрубок в матеріал має деякі особливості. Окрім наявності на поверхні матеріалу шару нанотрубок, для підвищення тиску, опромінення проводиться в прозорому конденсованому середовищі. При аналізі процесів враховується, по-перше, насипний характер нанотрубок і можливість проникнення, внаслідок цього, лазерного випромінення безпосередньо на поверхню підкладки. По-друге, вуглецеві нанотрубки неоднорідно розподілені по товщині зразка, тому окремі шари нанотрубок зміщені один відносно іншого і мають, таким чином, неоднакову кількість нанотрубок.

Розрахунки температури, тиску та напруження в матеріалах при дії лазерного імпульсу, коли опромінення відбувається на повітрі, проведені в ряді робіт [1-3], тому в даній роботі представлено розрахунки температури в матеріалі при опроміненні його наносекундним лазерним імпульсом в ПКС.

Комп’ютерне моделювання процесу внесення вуглецевих нанотрубок в матеріал під дією лазерних ударних хвиль складається з декількох етапів та проводиться за допомогою різних методів. На першому етапі проводиться розрахунок температурного поля в матеріалі під дією лазерного імпульсу в

режимі генерації ударної хвилі. Другий етап — моделювання процесу дії ПКС на внесення вуглецевих нанотрубок в матеріал.

При попаданні лазерного імпульсу на поверхню зразка-„сендвіча”, який складається з підкладки, на яку нанесений шар нанотрубок, які розчинені у толуолі, та покритій шаром ПКС, приповерхневий шар перетворюється у плазму, а в глибину зразка поширюється теплова і ударна хвилі.

При моделюванні розподілу температури в матеріалі під дією лазерного імпульсу в режимі генерації ударної хвилі, коли опромінення відбувається в ПКС були прийняті наступні умови:

1. $r_0 = \sqrt{a\tau}$ (r_0 - розмір плями на поверхні зразка, a - температуропровідність зразка, τ - тривалість імпульсу), задача теплопровідності зводиться до одномірної,
2. шар, в якому відбувається процес поглинання $\delta = 1/\mu$, де μ — коефіцієнт поглинання.

Під час дії лазерного імпульсу, шар товщиною $\delta = 1/\mu$ поглинає енергію, випаровується, перетворюється у плазму і передає свою енергію наступним шарам.

Проведені нами розрахунки показали, що незважаючи на зростання коефіцієнту поглинання у звичайних умовах з підвищенням температури за час дії імпульсу, в нашому випадку, внаслідок високих густин потоку лазерної енергії (до 10^9 Вт/см²), поверхневий шар досягає стану плазми за короткий час (< 5нс) практично для всіх досліджуваних металів та сплавів. Тому коефіцієнт поглинання приймався постійним. Для режиму з модульованою добротністю, що відповідає короткому часу дії лазерного імпульсу, в початковий момент дії часову структуру імпульсу описують лінійною залежністю від часу для $t > 10^{-9}$ с (рис. 1).

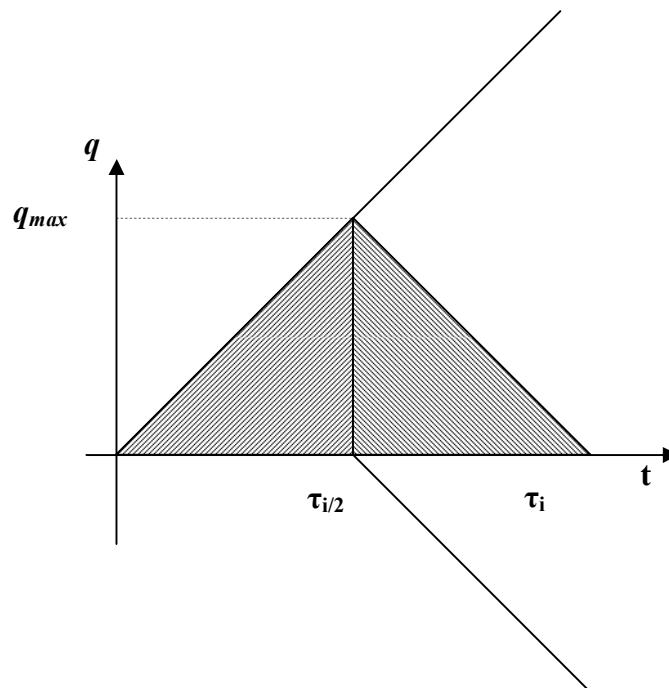


Рис.1. Часова – енергетична структура лазерного імпульсу в режимі модульованої добротності.

Комп’ютерне моделювання проводиться на основі розв’язків диференціального рівняння II – го роду

$$T(z, t) = \frac{q\sqrt{a}}{\lambda\tau_i} (4t)^{3/2} i^3 \operatorname{erfc} \frac{z}{2\sqrt{at}} \quad (1)$$

де T – температура зразка на глибині z в момент часу t ,

λ – коефіцієнт теплопровідності,

q – густина енергії,

a – коефіцієнт температуропровідності,

z – глибина,

$\operatorname{Ierfc}(u)$ - інтеграл ймовірності.

При застосуванні графічного методу моделювання нами було встановлено, що на форму модельованого лазерного імпульсу і його відповідність реальному впливає момент включення фіктивного джерела. З фізичних міркувань випливає, що при лінійному спаданні енергії імпульсу дія джерела енергії не припиняється.

Використовуючи теорію фіктивних джерел, отримано аналітичний розв’язок:

$$T(z, t) = \frac{q\sqrt{a}}{\lambda\tau_i} \left[(4t)^{3/2} i^3 \operatorname{erfc} \frac{z}{2\sqrt{at}} - (4(t-\tau))^{3/2} i^3 \operatorname{erfc} \frac{z}{2\sqrt{a(t-\tau)}} \right]. \quad (2)$$

При опроміненні матеріалу в ПКС процес дещо ускладнюється, оскільки процес нагрівання матеріалу значно продовжується після закінчення лазерного імпульсу. Джерелом енергії стає плазма матеріалу, утворена лазерним імпульсом і затримана ПКС.

Тривалість такого імпульсу визначається за допомогою формули

$$\tau = \frac{2l}{c}, \quad (3)$$

де l – товщина ПКС, c – швидкість звуку в даному ПКС.

Густина потоку, внаслідок перерозподілу енергії між зразком і ПКС, зменшується і дорівнює приблизно половині густини потоку лазерного імпульсу.

Після закінчення імпульсу на глибині z температура є більшою за температуру кипіння даного матеріалу. На цій глибині починається випромінювання, що призводить до порушення контакту. Розподіл температури в зразку обчислюється за формулою:

$$T = \frac{T_0 x^2}{(t + \frac{x^2}{2a}) 2a} e^{-\frac{z^2}{4a(t + \frac{x^2}{2a})}} \quad (4)$$

При моделюванні встановлено, що для початку плавлення поверхні алюмінію достатньо 5% енергії лазерного імпульсу, що був застосований в наших експериментах. Враховуючи особливості процесу внесення нанотрубок в матеріал, для обчислення енергії, яка потрапляє на підкладку, нами було

прийнято, що $E = kE_{\text{ног}}$, де k — коефіцієнт, який визначається співвідношенням максимуму густини насипаних вуглецевих нанотрубок до густини вуглецю

$$k = \frac{\rho_{\text{вуг.нанотрубок}}}{\rho_c} \quad (5)$$

Згідно цих міркувань $k=0,25$, а енергія, яка потрапляє на поверхню підкладки становить $\approx 25\%$ від падаючої енергії на зразок—„сендвіч”.

При одночасному нагріванні нанотрубок і підкладки відбувається проплавлення підкладки та втиснення нижнього шару нанотрубок в підкладку. Оскільки процес нагрівання залежить від теплофізичних властивостей матеріалів, то за час нагрівання вуглецевих нанотрубок товщиною 2 мкм, наприклад, шар алюмінію товщиною 7 мкм прогріється до температури плавлення.

За допомогою моделювання встановлено, що при опроміненні покритої вуглецевими нанотрубками підкладки, кінцевий шар нанотрубок не прогривається. Тому розігрівання поверхні підкладки при впровадженні нанотрубок відіграє первинну роль.

При опроміненні в ПКС процес значно відрізняється, оскільки частина нанотрубок вплавляються в підкладку. На основі комп’ютерного моделювання, електронно-мікроскопічного аналізу та картини розльоту нанотрубок можна дати наступне пояснення процесів, що відбуваються при внесенні нанотрубок в алюміній та фторопласт. В перший момент дії лазерного імпульсу енергія випромінювання поглинається верхнім шаром нанотрубок. Розрахунки показують, що за 1 нс температура цього шару досягає температури плазми. При цьому, якщо вважати, що нанотрубки утворюють суцільний шар товщиною 20 мкм, то вплавлення нанотрубок в алюмінієвий та фторопластовий зразки неможливе, тому що навіть при ідеальному тепловому контакті температура на границі шару нанотрубок з підкладкою не перевищує 1 K, при умові, що процес нагрівання складається не тільки із нагрівання лазерним імпульсом, але й з післядії, пов’язаною з плазмою, що, як вже зазначалось, діє протягом часу в 20 разів більшого від тривалості імпульсу.

При опроміненні на повітрі алюмінієвого зразка за допомогою мікроскопії та хімічного аналізу виявлено внесення нанотрубок. Проте при таких же умовах опромінення фторопластового зразка внесення нанотрубок не спостерігається. Оскільки коефіцієнт поглинання фторопласту є порядку 1 м^{-1} , вся енергія лазерного імпульсу поглинається зразком. При опроміненні фторопластового зразка на повітрі поверхня зразка залишається незмінною. Коли опромінення відбувається в ПКС, на поверхні фторопластового зразка помітні внесені нанотрубки.

Для пояснення факту внесення вуглецевих нанотрубок в фторопластову підкладку при наявності ПКС необхідно враховувати твердість фторопласта, величина якої є дуже мала і дорівнює $4\text{-}5 \text{ кгс/мм}^2$.

Виходячи з цього, нанотрубки втискаються у фторопластову підкладку за рахунок меншої величини твердості матеріалу та збільшенні тиску плазми на нанотрубки при наявності ПКС.

Розроблена програма дозволила розв’язати і інші задачі. Так, за допомогою комп’ютерного моделювання температурного поля були проаналізовані експериментально отримані електричні сигнали, що виникають на контакті двох металів при дії лазерного імпульсу в режимі генерації ударної хвилі. Дослідження показали, що термоелектричний сигнал, який виникає при дії лазерних ударних хвиль на матеріал, залежить від параметрів ударної хвилі та фізичних властивостей матеріалу.

Розроблена модель розрахунку температурного поля матеріалу, опроміненого в прозорому конденсованому середовищі лазером, що генерує ударні хвилі може застосовуватись як одна із складових експрес-методики діагностування пошкоджень в матеріалах.

Висловлю подяку проф. Нікіфорову Ю.М., доц. Ковалюку Б.П. та доц. Гладьо В.Б. за допомогу та надання необхідних матеріалів.

[1] Кузяков Ю.Я., Трофимов И.А., Широков И.Я. Комп’ютерное моделирование абляции под воздействием наносекундного лазерного импульса на графитовую пластинку // ЖТФ.- 2005.- Т. 78, Вып.2.- С. 14-19.

[2] Yilbas B.S., Shuja S.Z., Arif A., Gondal M.A. Laser-shock procesing of steel // Journal of Materials Processing Technology.- 2003.- V. 135.- P. 6-17.

[3] Thorslund T. Kahlen F., Kar A. Temperatures, pressures and streeses during laser shock processing // Optic and Laser in Engineering.- 2003.- V. 39.- P. 51-71.

ТРАНСПОРТНІ ЯВИЩА У ТВЕРДИХ РОЗЧИНАХ НА ОСНОВІ СПОЛУК IV-VI

Никируй Л.І.

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
e-mail: lyubomyr.nykyruy@gmail.com

Матеріали на основі сполук IV-VI відносяться до напівпровідників із вузькою забороненою зоною, величина якої може змінюватися в залежності від складу, зовнішніх тиску і температури, магнітного поля. Це обумовлює їх використання для створення фотоприймачів та інжекційних лазерів для оптичного діапазону 3-30 мкм. У зв'язку із цим, використання халькогенідів свинцю, особливо у конструкціях багатоелементних фотоприймачів, забезпечує кращу відтворюваність характеристик при меншій собівартості і більш високій чутливості, особливо в області довгих хвиль. Висока потужність джерел випромінювання дозволяє використовувати їх у швидкодіючих спектрометрах для контролю складу атмосфери, у молекулярній спектроскопії, у системах космічного зв'язку, отримання теплових зображень і дистанційного заміру температур, тощо. Важливим питанням для створення нових перспективних матеріалів є дослідження твердих розчинів, які у порівнянні із бінарними сполуками дають можливість за рахунок зміни складу ефективно впливати на основні властивості: ширину забороненої зони, спектральні і температурні характеристики.

Ефективність функціонування фотоприймальних пристроїв і лазерних джерел випромінювання визначається характеристиками матеріалу та електронними процесами, що протікають у ньому. Серед останніх найбільш важливу роль відіграють механізми розсіювання носіїв заряду. Процеси розсіювання носіїв детально вивчені для бінарних напівпровідникових сполук [1]. Однак для твердих розчинів, не дивлячись на велику кількість експериментальних даних, теоретичний аналіз таких процесів практично відсутній.

У роботі досліджено тверді розчини системи PbS_xSe_{1-x} . Заміна атомів одного халькогену на інший у даному випадку призводить до утворення твердого розчину заміщення через близькість по значенню атомних радіусів, величини електронегативності та постійної ґратки. Утворення твердих розчинів призводить до перекриття енергетичних зон базових матеріалів, що у свою чергу спричинює складний характер рівня Фермі. Відповідно до цього, аналіз домішкового розсіювання не можна здійснювати у стандартному наближенні часу релаксації [2]. Тому розрахунки домінуючих механізмів розсіювання проводили з використанням варіаційної процедури [1]. Для коректного розрахунку слід враховувати специфіку зміни параметрів матеріалу при переходу від бінарних сполук до твердих розчинів. Стала ґратки утвореного твердого розчину визначалася за законом Вегарда [2], ширина забороненої зони, яка у першому наближенні носить лінійний характер, визначена згідно узагальнення експериментальних даних по [3], а деформаційна стала, яка

найбільш чутлива при заміні одних атомів іншими, визначалася по методиці [4].

Досліджено концентраційні та температурні залежності рухливості носіїв заряду твердого розчину $\text{PbS}_x\text{Se}_{1-x}$ при врахуванні розсіювання носіїв: на акустичних та оптичних коливаннях ґратки, на кулонівському та короткодіючому потенціалах вакансій. Показано, що в інтервалі температур 4,2-300 К досить добре співпадання із експериментальними даними дає врахування розсіювання носіїв заряду на акустичних фонах. Однак, для точного розрахунку електрофізичних параметрів слід враховувати сумарну дію кількох механізмів розсіювання. Так, при 4,2 К у концентраційному інтервалі 10^{22} - 10^{26} м^{-3} суттєвим також буде врахування розсіювання на короткодіючому потенціалі вакансій, а для концентрацій 10^{22} - $2 \div 3 \cdot 10^{23}$ м^{-3} – на кулонівському. При 77 К кулонівське розсіювання, яке для таких температур все ще суттєве для бінарних сполук, не буде домінуючим, зате для концентрацій 10^{22} - 10^{23} м^{-3} необхідно враховувати вже вплив розсіювання на оптичних фонах. При 300 К менш помітним стає розсіювання на короткодіючому потенціалі, яке суттєве лише в області високих концентрацій ($\sim 10^{26}$ м^{-3}), а розсіювання на оптичних фонах дає помітний внесок у сумарне для більш широкого концентраційного діапазону – 10^{22} - 10^{24} м^{-3} .

Робота частково фінансується МОН України (державний реєстраційний номер 0109U007537).

- [1] Горлей П.Н., Шендеровский П.Н. Вариационный метод в кинетической теории.- К.:Наукова думка, 1992.
- [2] Фистуль В.И. Введение в физику полупроводников.- М.: Высшая школа, 1975.
- [3] Preier H. // Appl.Phys., 20, 189 (1979).
- [4] Фальковский Л.А. // УФН, 178(9), 923 (2008).

КІНЕТИЧНІ ЯВИЩА У ЛЕГОВАНИХ ІНДІЄМ КРИСТАЛАХ НА ОСНОВІ PbTe

Дзумедзей Р.О.

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
e-mail: fcss@pu.if.ua

Легування суттєвим чином впливає на електронні стани і властивості напівпровідникових матеріалів та наноструктур на їх основі. Елементи III групи періодичної таблиці елементів (Ga, In, Tl) у напівпровідниках IV-VI утворюють глибокі резонансні домішкові енергетичні рівні. Важливим є вивчення впливу домішкових станів у кристалах PbTe на механізми розсіювання носіїв струму.

Для розрахунків рухливості носіїв електричного заряду нами використано варіаційний метод, у якому зазвичай пробну функцію вибирають у вигляді ряду по степенях енергії, коефіцієнти якого є підгоночними параметрами і визначаються умовою найкращого співпадання теоретичних та експериментальних результатів [1]. При цьому, використовуючи стандартну варіаційну процедуру [2] отримують достатньо простий вираз для розрахунку рухливості.

Використовуючи варіаційний принцип, виконано розрахунок рухливості носіїв заряду у кристалах телуриду свинцю, легуваних індієм та проаналізовано характер домішкового розсіювання залежно від зміни температури і вмісту домішки ((0,002 ÷ 0,2) ат. % In). Показано, що із ростом температури (від 4,2 К) починає зростати внесок розсіювання на вакансіях, акустичних фононах, а від температур (15-30) К збуджуються оптичні коливання кристалічної ґратки. З цих позицій добре пояснюється наявність піку на температурній залежності рухливості, який, залежно від вмісту домішки, розташований в інтервалі азотних температур.

Падіння рухливості із збільшенням вмісту домішки індію, як видно із наших розрахунків, зумовлене як зміщенням рівня Фермі до дна зони провідності, так і зростанням випадкового потенціального рельєфу. Згідно [3], при вмісті індію менше 0,12 ат. % In зменшення рухливості плавне і пояснюється збільшенням кількості розсіюючих атомів In, причому переріз розсіювання відповідає розсіюванню на короткодіючому потенціалі домішки. При вмісті домішки більше 0,12 ат. % In спостерігається різке падіння рухливості, що пояснюється виникненням випадкового потенціального рельєфу.

Робота частково фінансується МОН України (державний реєстраційний номер 0109U007537).

[1] Заячук Д.М. К вопросу о доминирующих механизмах рассеяния в теллуриде свинца // ФТП.- 1997.- Т. 31(2).- С. 217–220.

[2] Горлей П.Н., Шендеровский В.А. Вариационный метод в кинетической теории.- К.: Наукова думка, 1992.- 296 с.

[3] Равич Ю.И., Немов С.А. Прыжковая проводимость по сильно локализованным примесным состояниям индия в PbTe и твердых растворах на его основе. Обзор // Физика и техника полупроводников.- 2002.- Т. 36(1), С. 3-23.

АУТОФЛУОРЕСЦЕНЦІЯ БІОЛОГІЧНИХ ТКАНИН ТА ЇЇ ВИКОРИСТАННЯ ДЛЯ ДІАГНОСТИКИ РАКОВИХ ЗАХВОРЮВАНЬ

Кравченко В.М.¹, Бурий О.М.², Ковальчук І.М.¹, Ящук В.М.¹, Кушнір К.М.¹

¹*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,*

²*Інституту хірургії та трансплантології ім. О.О.Шалімова АМН України, Київ*
e-mail: krav@univ.kiev.ua,

Люмінесцентні методи аналізу знаходять широке застосування в науці й техніці. Останні десять років інтенсивно розвиваються люмінесцентні методи діагностики захворювань внутрішніх органів людини в медицині, коли за допомогою світловодів збуджувальне лазерне випромінювання вводиться всередину досліджуваного органу, а через іншу групу світловодів люмінесцентне випромінювання виводиться назовні, реєструється й аналізується. В медичній літературі є відомості про те, що таким чином можна виявляти онкологічні захворювання внутрішніх органів на ранніх стадіях їх розвитку.

Існують два основні методи люмінесцентної діагностики (візуалізації пухлин): 1) флуоресцентна діагностика з використанням фотосенсибілізаторів – спеціальних препаратів, які навмисно вводяться в організм хворої людини та які здатні накопичуватися в осередках захворювання і давати інтенсивну флуоресценцію при лазерному збудженні, та 2) аутофлуоресцентна діагностика, яка базується на відмінності спектрів власної фотолюмінесценції (аутофлуоресценції) здорових та уражених тканин даного органу. Перевагою останнього методу є те, що пацієнту не потрібно приймати або вводити йому внутрішньо жодні хімічні препарати.

В біологічних тканинах центрами люмінесценції є невелика кількість біологічно важливих молекул. Досліджуючи фотолюмінесцентні властивості, зокрема спектри флуоресценції цих молекул, можна одержати інформацію про біохімічні процеси в живій клітині, і зокрема визначити, здорова чи хвора ця клітина, що дозволяє проводити люмінесцентну діагностику захворювань внутрішніх органів людини.

Метою даної роботи було дослідження аутофлуоресценції (АФ) тканин шлунку людини та тканин шлунку інших ссавців – щурів – для встановлення природи центрів випромінювання та вивчення можливостей реалізації аутофлуоресцентної діагностики захворювань внутрішніх органів людини.

У роботі вимірювалися спектри АФ зразків вказаних тканин та спектри збудження АФ. Для збудження АФ використовувалися імпульсний азотний УФ-лазер ($\lambda = 337$ нм), ртутна лампа (лінії випромінювання 254 та 313 нм) та імпульсна ксенонова лампа з неперервним спектром випромінювання (монохроматором виділялася вузька спектральна область). Вказані спектри вимірювалися за допомогою спектрометрів на базі ИСП-28 та МДР-3, а також флуоресцентного спектрофотометра Varian Cary Eclipse.

В спектрах АФ досліджених зразків тканин шлунку людини виявлено три широкі смуги АФ з максимумами при 390, 430, 460 нм. В спектрах АФ досліджених зразків тканин шлунку щурів виявлено усього дві смуги АФ з максимумами при 390 та 480 нм. Максимуми спектрів збудження виявлених смуг АФ відповідають наступним довжинам хвиль: 340 нм (для смуги АФ 390 нм), 350 нм (для смуги АФ 430 нм), 290 та 350 нм (для смуг АФ 460 та 480 нм).

За спектрами АФ та спектрами збудження смуг АФ були ідентифіковані флуоресцентні біомолекули, які люмінесцюють у досліджених тканинах. Так, смуга АФ з максимумом при 390 нм зумовлена свіченням молекули колагену (головного білка з'єднувальної тканини в організмі людини, входить до складу хрящів, сухожилів, зв'язок та кісток), смуга 430 нм – молекули еластину (структурного білка, присутнього в еластичній з'єднувальній тканині тварин і людини), а смуги 460 та 480 нм – молекули NADH (кофермента, за участю якого каталізуються оборотні реакції окислення, що відбуваються при енергетичному обміні та в процесі дихання усіх без винятку живих клітин).

У спектрах АФ зразків тканин шлунку людини (здорової та ураженої пухлиною) у фізіологічному розчині спостерігалась одна смуга при 460 нм (NADH). Відносна інтенсивність смуги АФ ураженої раковою пухлиною тканини як мінімум удвічі менша за інтенсивність смуги АФ здорової тканини у порівнянні з розсіяною лінією випромінювання газового розряду лазера.

У спектрах АФ зразків тканин шлунку людини (здорової та ураженої пухлиною) у формаліні спостерігались дві смуги при 390 нм (колаген) та 430 нм (еластин). Для ураженої пухлиною тканини інтенсивність АФ була помітно меншою, ніж для здорової. Крім того, співвідношення між інтенсивностями смуг 390 та 430 нм змінювалося (домінувала короткохвильова смуга 390 нм).

Таким чином, спектри АФ тканин шлунку, уражених раковими пухлинами, відрізняються від спектрів здорових тканин якісно (формою спектра) та кількісно (інтенсивністю смуг АФ). В усіх випадках наявність злякисної пухлини призводить до зменшення інтенсивності люмінесценції тканини. Інтенсивність усіх виявлених смуг АФ препаративних тканин зменшується з часом, що свідчить про незворотні процеси в живих клітинах, які супроводжуються зменшенням кількості центрів свічення.

МОРФОМЕТРИЧНИЙ АНАЛІЗ РОЗПОДІЛУ МІКРОЧАСТОК КАРБІДУ КРЕМНІЮ ДЕПОНОВАНОГО НА Fe/NiP

Федосов А.В, Коменда Т.І., Коровицький А.М.

Луцький національний технічний університет,
e-mail: andriykor@gmail.com

В роботі здійснено детальні оптичні дослідження та морфометричний аналіз карбіду кремнію SiC депонованого на багат шарову структуру Fe/NiP. Дослідження проводилися на цифровому оптичному відеомікроскопі DIMIC™ при 100х кратному оптичному збільшенні з використанням коаксіального метал - галоїдного джерела освітлення.

Базуючись на ряді здійснених експериментів для аналізу було відібрано типові знімки поверхні (рис.1), математичний аналіз яких здійснено на базі програмного забезпечення MIMAS®. На рис. 2 відображено відповідний результат бінаризації.

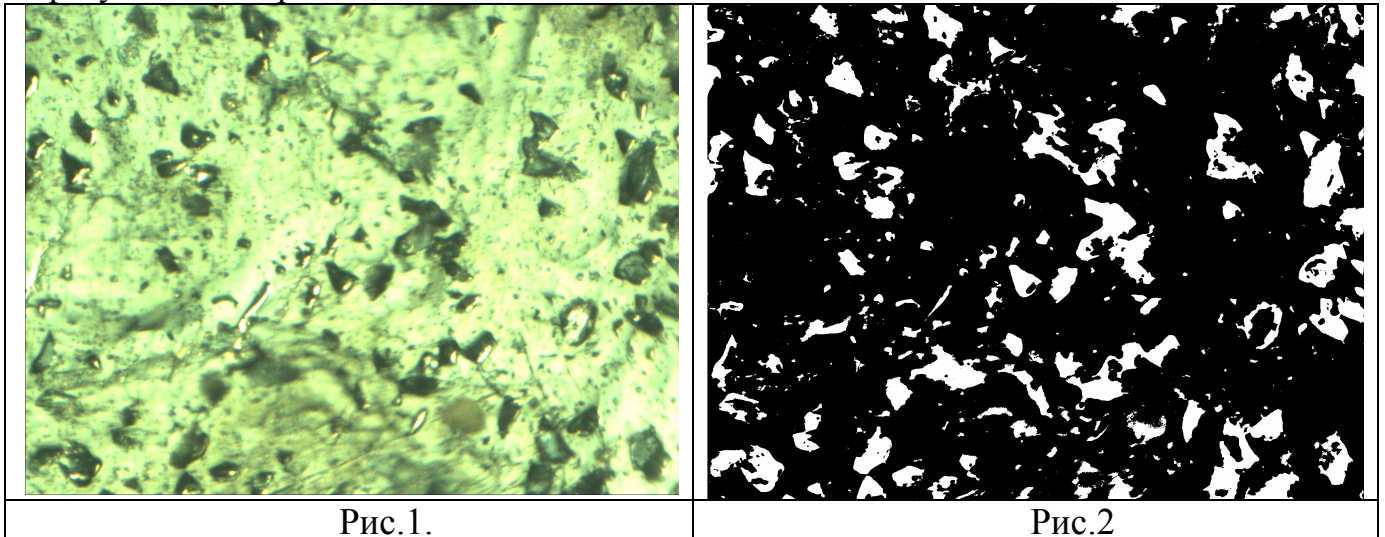


Рис.1.

Рис.2

Для депонованого карбіду кремнію SiC був розрахований ряд морфометричних параметрів та побудовані діаграми розподілу часток, рис.3. На рис 3а представлений розподіл кількості часток за площею, на рис 3б – за компактністю, на рис 3в – за видовженням.

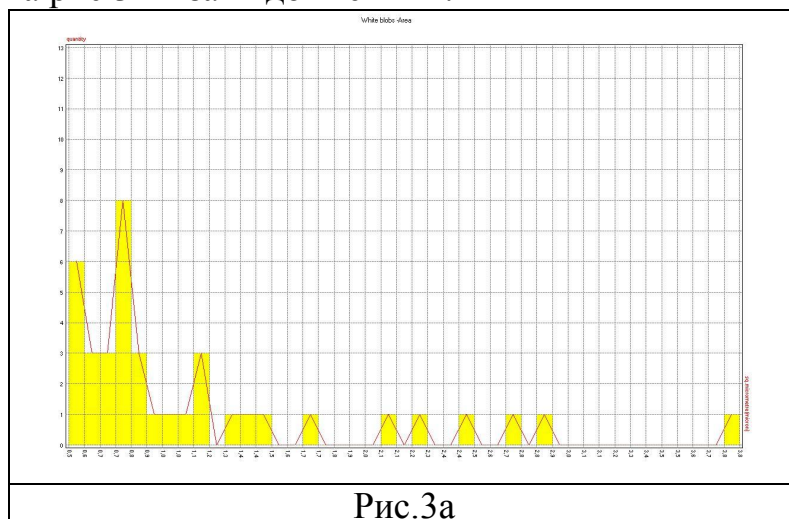


Рис.3а

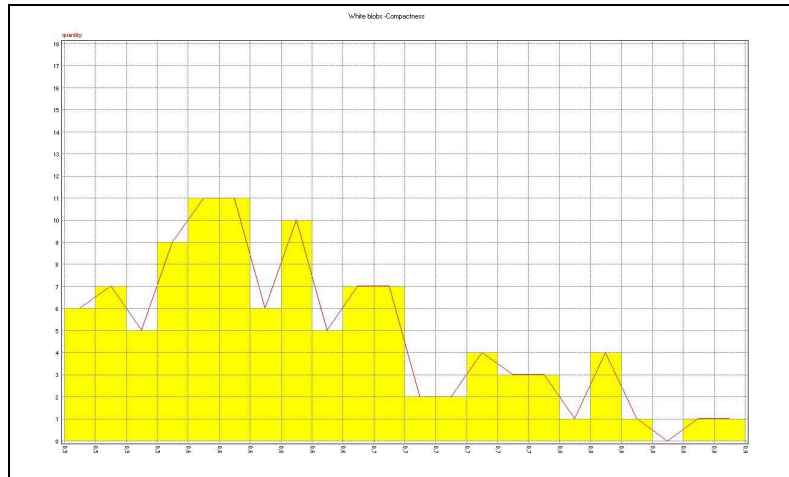


Рис.3б

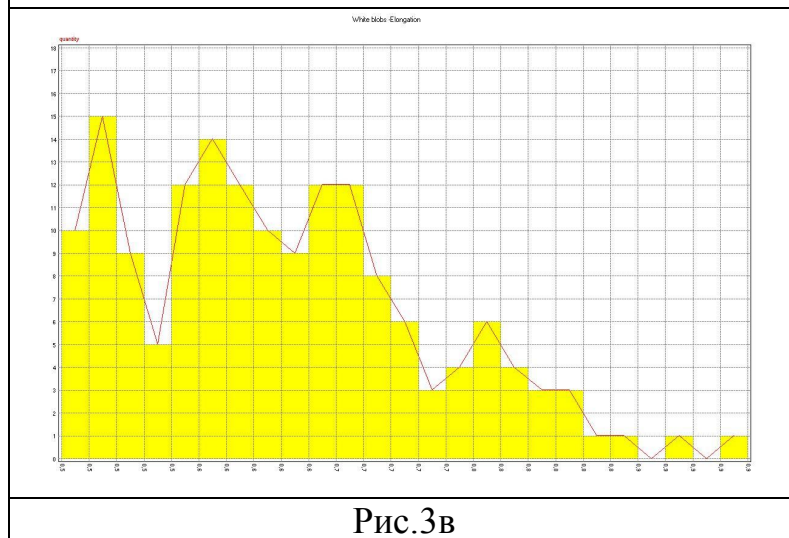


Рис.3в

Аналіз профілів розподілу часток показав наближення їх до гіперболічного виду, та дозволив отримати ряд результатів:

- Площа більшості частинок коливається в межах $0.5 - 2.5 \mu\text{m}^2$.
- Аналіз розподілу площ показує, що кількість частинок малих розмірів є значно більшою і плавно зменшується з збільшенням їх площі.
- Аналіз розподілу компактності показує, що кількість округлих частинок є меншою. Наявний пік кількості частинок в діапазоні $0.5-0.6$. Це свідчить про те, що більшість частинок мають складну форму.
- Аналіз розподілу видовження показує, що кількість округлих частинок є меншою. Наявний пік кількості частинок в діапазоні $0.5-0.7$. Це свідчить про те, що більшість частинок видовжені у відношенні $\frac{1}{2}$ між головною і додатковою віссю видовження.

ВПЛИВ ГЛИБОКИХ ЕНЕРГЕТИЧНИХ РІВНІВ НА П’ЄЗООПІР $n-Si$

Федосов А.В., Луньов С.В., Федосов С.А.

Луцький національний технічний університет,
e-mail: luniovser@mail.ru

Як в пізнавальному, так і практичному аспектах цікавим є вивчення особливостей ефекту п’єзоопору в $n-Si$ при наявності в його забороненій зоні глибоких енергетичних рівнів, що належать радіаційним дефектам. Як відомо, переважаючим радіаційним дефектом в γ -опроміненому $n-Si$ з високим вмістом домішки кисню є глибокий енергетичний рівень $E_c - 0,17 eV$, що належить А-центру (комплекс вакансії з міжвузловим атомом кисню) [1,2].

Для дослідження впливу радіаційних дефектів на п’єзоопір $n-Si$, в умовах $X // J // [100]$, в нашій роботі використовувались кристали $n-Si$ з питомим опором $\rho_{300K} = 30 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ і вихідною концентрацією носіїв струму $n = 1,24 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, які опромінювались γ -квантами Co^{60} дозою $3,8 \cdot 10^{17} \frac{\text{Кв.}}{\text{см}^2}$

На рис. 1 приведено результати вимірювання поздовжнього п’єзоопору γ -опромінених кристалів $n-Si$ при різних фіксованих температурах в умовах $X // J // [100]$.

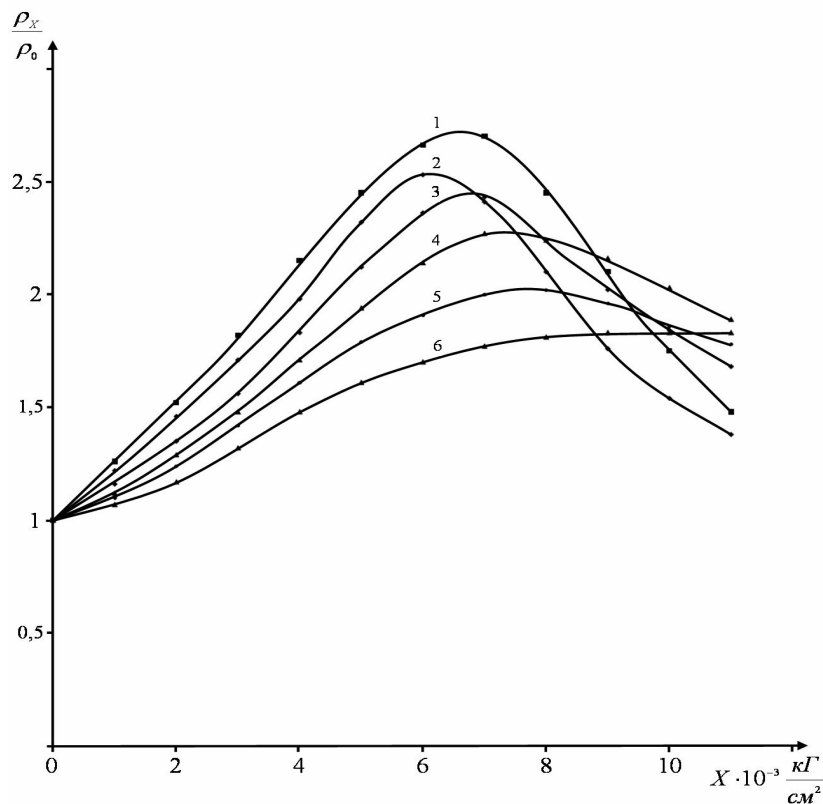


Рис. 1 - Залежності $\frac{\rho_x}{\rho_0} = f(X)$ після γ -опромінення кристалів $n-Si$ дозою

$\Phi = 3,8 \cdot 10^{17} \frac{\text{Кв.}}{\text{см}^2}$ для випадку, коли $X // J // [100]$, при різних температурах T, K : 1-77, 2-120, 3-135, 4-170, 5-200, 6-300.

На рис.2 приведено температурну залежність концентрації носіїв струму в γ -опромінених кристалах $n-Si$ дозою $3,8 \cdot 10^{17} \frac{КВ.}{см^2}$. Як видно з рис.2, особливістю залежності $n = f(\frac{10^3}{T})$ є перехід від "повного" нахилу рівня $E_c - 0,17 eV$ при температурах $T \leq T_x$ до "половинного" при $T > T_x$. Згідно з рис.2, характеристична температура переходу $T_x = 148K$, а відповідна їй концентрація $n(T_x) \cong 4 \cdot 10^{13} см^{-3}$. Значення величини зміни енергетичної щільності між глибоким рівнем E_e і нижніми долинами зони провідності при деформації (при $T = const$) рівне [3]:

$$\frac{d(\Delta E)}{dX} = - \frac{kT}{n_e(X_0)} \operatorname{tg} \beta_0, \quad (8)$$

де $\operatorname{tg} \beta_0$ - тангенс кута нахилу дотичної до залежності $n_e = f(X)$ в точці X_0 , в якій $n_e(X_0) = n(T_x)$.

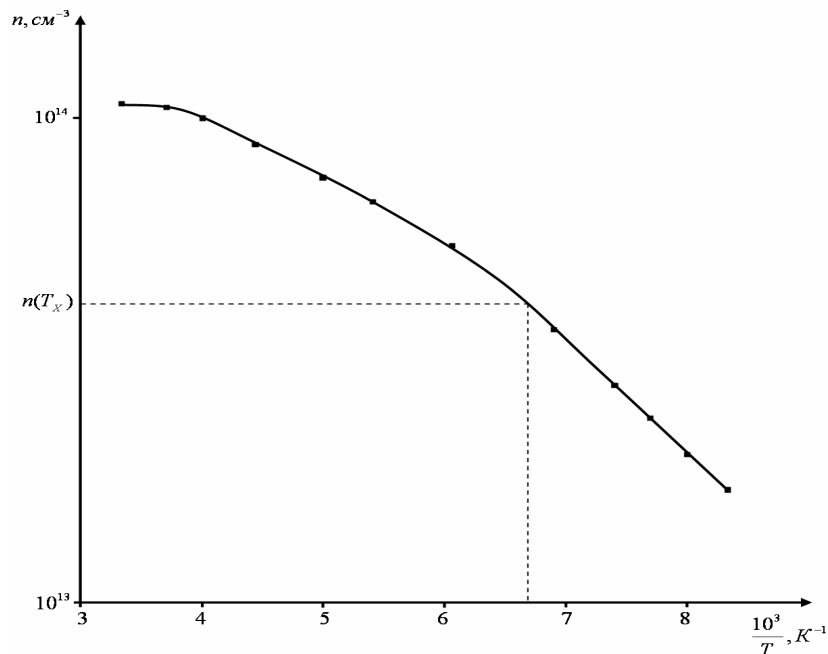


Рис. 2 - Температурна залежність концентрації носіїв струму в γ -опроміненому $n-Si$ дозою $3,8 \cdot 10^{17} \frac{КВ.}{см^2}$.

Величина зміни енергетичної щільності між глибоким рівнем $E_c - 0,17 eV$ і дном зони провідності $n-Si$, коли $X // J // [100]$, в розрахунку на кожні $10^3 \frac{КВ.}{см^2}$ виявилась рівною: $(2,45 \pm 0,1) \cdot 10^{-3} eV$.

[1] Конозенко И.Д., Семенюк А.К., Хиврич В.И. Радиационные эффекты в кремнии. – К.: Наукова думка, 1974. – 200 с.

[2] Семенюк А.К. Радиационні ефекти в багатодолинних напівпровідниках.- Луцьк: “Надстир’я”.-2001.- 323 с.

[3] Федосов А.В., Луньов С.В., Захарчук Д.А., Федосов С.А., Тимошук В.С. Визначення швидкості зміщення глибоких енергетичних рівнів в монокристалах кремнію при одновісній пружній деформації // Науковий вісник ВНУ. Серія фізичні науки.- Луцьк: Волинський національний університет ім. Лесі Українки.-2008, №18.с. 54-58.

ВИЗНАЧЕННЯ КОЕФІЦІЄНТУ ДИФУЗІЇ ВОДНЮ В ГІДРИДОТВІРНИХ МЕТАЛАХ

Мохун С.В., Бачинський Ю.Г., Басістий П.В.

Тернопільський національний педагогічний університет ім. В.Гнатюка

e-mail: mohun_serгей@ukr.net

Гідридотвірні метали V групи (V, Nb, Ta) та їх сплави широко застосовуються в сучасній техніці. При цьому важливого значення набуває вивчення закономірностей зміни дифузійних параметрів водню (розчинності, проникливості та коефіцієнту дифузії) в залежності від температури, способу наводнення та умов хіміко-термічної обробки. Основними стадіями взаємодії водню з металами є [1]:

- дифузія молекул газу до поверхні металу;
- адсорбція на металевій поверхні і дисоціація з наступною хемосорбцією;
- перехід атомів з хемосорбованого шару в кристалічну ґратку;
- дифузія атомів у кристалічній ґратці;
- виділення з металу та молізація газу.

Залежно від фазово-структурного стану матеріалу та впливу зовнішніх факторів визначальною стадією є найповільніша. Рівняння дифузії водню в металевих системах мають вигляд [1]:

$$P = P_0 \cdot \exp(-E_P/RT), \quad D = D_0 \cdot \exp(-E_D/RT), \quad S = S_0 \cdot \exp(-H_S/RT), \quad (1)$$

де P – коефіцієнт водневої проникливості, D – коефіцієнт дифузії, S – розчинність водню, E_P та E_D – енергії активації відповідних процесів, H_S – теплота розчинення, P_0 , D_0 і S_0 – передекспоненційні множники. Коефіцієнт розчинності можна визначити з рівняння $P = S \cdot D$. При цьому $S_0 = P_0/D_0$, а $H_S = E_P - E_D$. Концентрацію газу в металі можна розрахувати за законом Сівертса

$$C = S \cdot p_{\text{H}_2}^{1/2}, \quad (2)$$

де p_{H_2} – тиск водню у газовій фазі.

У сучасній енергетиці виробі з конструкційних матеріалів на основі металів V групи експлуатуються, в основному, за постійного тиску водню – змінюється лише температурний інтервал їх застосування. Тому всі дослідження і розрахунки за наводнювання з газової фази проведені за тиску H_2 - 10^5 Па. Температурний інтервал досліджень 600 - 1000°C . Електролітичне наводнення здійснювали при кімнатній температурі в 26%-ному розчині сірчаної кислоти H_2SO_4 за густини струму 35 А/дм^2 .

Найважливішою характеристикою для практичного застосування таких матеріалів є

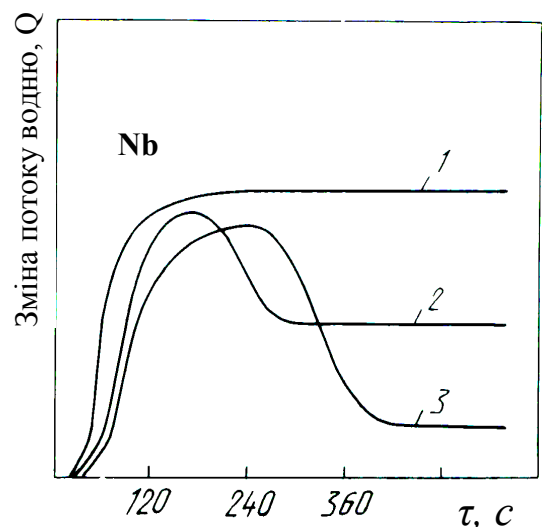


Рис.1. Температурні залежності зміни потоку водню крізь ніобій. 1 – 1000°C , 2 – 900°C , 3 – 700°C

їх воднева проникливість P , визначаючи яку встановлюють екологічно безпечний рівень втрат водню та його ізотопів через стінки виробів у навколишнє середовище [1]. Оскільки метали V групи при взаємодії з воднем гідридно окричуються, то безпосередні вимірювання P методом проникання крізь металеву мембрану, наприклад, у випадку ніобію (рис. 1), можна проводити лише вище 950°C [2]. Тут кінетика зміни потоку водню виходить на стаціонарну залежність (крива 1), що відповідає існуванню в металі лише α -твердого розчину водню. За зниження температури проведення експерименту кількість проникаючого водню після виходу кривих 2 і 3 на максимум різко зменшується, що вказує на початок взаємодії атомів водню між собою (утворення гідридної β -фази). Подальше зростання концентрації водню при зменшенні температури нижче 600°C приводить до руйнування зразків.

В основу визначення D покладена методика, яка базується на пропорційності між кінетикою зміни електроопору і концентрацією втіленого водню: $\Delta\rho(\tau) = \kappa \cdot Q(\tau)$, де κ – константа пропорційності [1]. При цьому електроопір ρ , як і концентрації водню в зразку, змінюється за експоненційною залежністю. Логарифмуючи експериментально отриману криву зміни електроопору від часу наводнювання τ , отримуємо рівняння прямої в координатах $\ln\Delta\rho - \tau$, у тангенс кута нахилу якої входить коефіцієнт дифузії водню, який для зразків у формі паралелепіпеда задається рівнянням

$$D = \frac{l_1^2 \cdot l_2^2 \cdot l_3^2}{\pi^2 (l_2^2 \cdot l_3^2 + l_1^2 \cdot l_3^2 + l_1^2 \cdot l_2^2)} \cdot \text{tg}\alpha \quad (3)$$

де l_1, l_2, l_3 - розміри ребер паралелепіпеда. Формулу (3) можна застосовувати і при десорбції газу, і при насиченні металу воднем.

На рис. 3а приведені результати високотемпературного вимірювання коефіцієнта дифузії водню в металах V групи методом електропровідності для α -твердого розчину водню, проекстрапольовані в область кімнатних температур (світлі точки). Екстраполяцію проводили з метою порівняння D водню, визначених за наводнювання з газової фази і середовища електроліту. За електролітичного наводнення застосовували дві методики.

Перша з них полягала у визначенні кінетики зміни електроопору при насиченні воднем зразків з наступним розрахунком D за формулою (3). Результати розрахунків, позначені на рис. 3а точками \otimes , дещо перевищують значення D , отримані за екстраполяції високотемпературних залежностей. На нашу думку, це зумовлено тим, що в даному випадку стан поверхні зразка на проникання водню не впливає, а наводнення зразків відбувається лише під впливом градієнта концентрації водню.

Друга методика базується на визначенні часу насичення металу воднем, значення якого підставляли у формулу Беррера

$$D = \frac{l^2}{4t} \quad (4)$$

де l - віддаль, на яку дифундує водень за час t . При цьому коефіцієнт дифузії водню визначали наступним чином.

Зразок на ділянках, обведених на рис. 2а пунктиром, покривали лаком, який не пропускає водень. Після цього електролітично наводнювали середню частину зразка l_H і за певні проміжки часу вимірювали електроопір ділянок l_2 і l_3 . За отриманими залежностями (рис. 2б) знаходили час t , необхідний для того, щоб водень продифундував на відстань $l = l_3 - l_2$. Потім розраховували коефіцієнт дифузії за формулою (4). Отримані результати показані на рис. За темними точками.

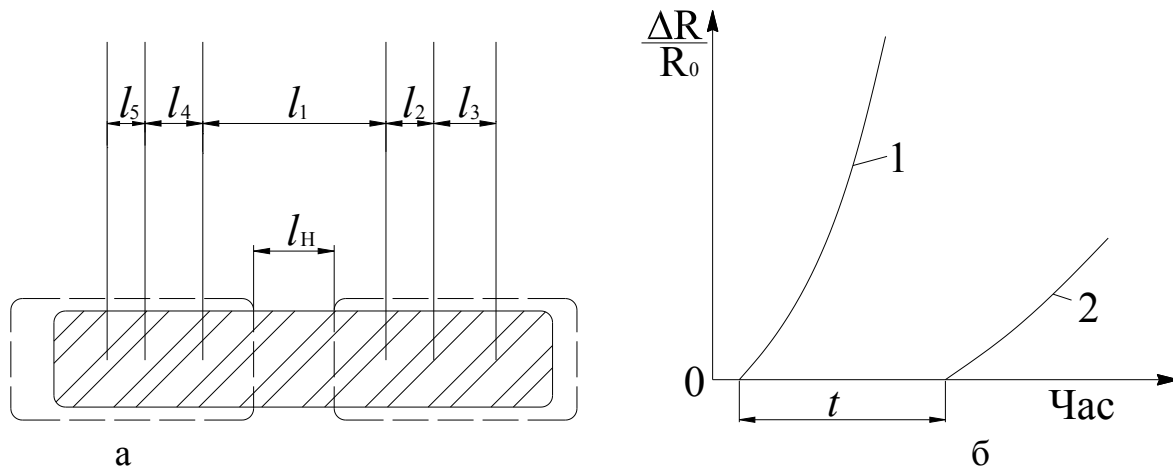


Рис. 2. Схема вимірювання електроопору (а) та типовий графік кінетики його зміни на двох послідовно розміщених ділянках зразка. l_2 – крива 1, l_3 – крива 2.

Неспівпадання результатів, отриманих за цими двома методиками, можна пояснити наступним чином. У першому випадку визначали коефіцієнт дифузії водню на початковій стадії наводнювання за кінетикою його проникання під впливом градієнту концентрації. У другому випадку фіксували кінцевий результат наводнювання - утворення гідридних фаз, коли атоми водню вже провзаємодіяли між собою. Отже, для α -твердого розчину водню в металах V групи коефіцієнти дифузії водню, отримані за різних способів наводнювання, практично співпадають і описуються рівняннями :

$$\text{для ванадію} \quad D_{\alpha}(\text{м}^2/\text{с}) = 3,1 \cdot 10^{-8} \cdot \exp(-4,6 \text{ кДж/моль} / RT),$$

$$\text{для ніобію} \quad D_{\alpha}(\text{м}^2/\text{с}) = 5,0 \cdot 10^{-8} \cdot \exp(-10,2 \text{ кДж/моль} / RT),$$

$$\text{для танталу} \quad D_{\alpha}(\text{м}^2/\text{с}) = 2,0 \cdot 10^{-8} \cdot \exp(-14,0 \text{ кДж/моль} / RT).$$

Підтвердженням отриманих результатів може служити те, що при утворенні гідридної фази енергія активації дифузії водню E_D зростає (кут нахилу політерм на рис. 3б) [5].

При цьому отримані нами дані найбільш близькі до кривої 2, звідки слідує, що концентрація водню в проведених нами експериментах визначення D за формулою (4) приблизно відповідає $H/Nb = 0,07$. Крім того, як показано в [4], $\alpha \leftrightarrow \beta$ фазовий перехід в системі Nb-H супроводжується збільшенням E_D від $(10,8 \pm 1,38)$ до $(37,7 \pm 7,45)$ кДж/моль.

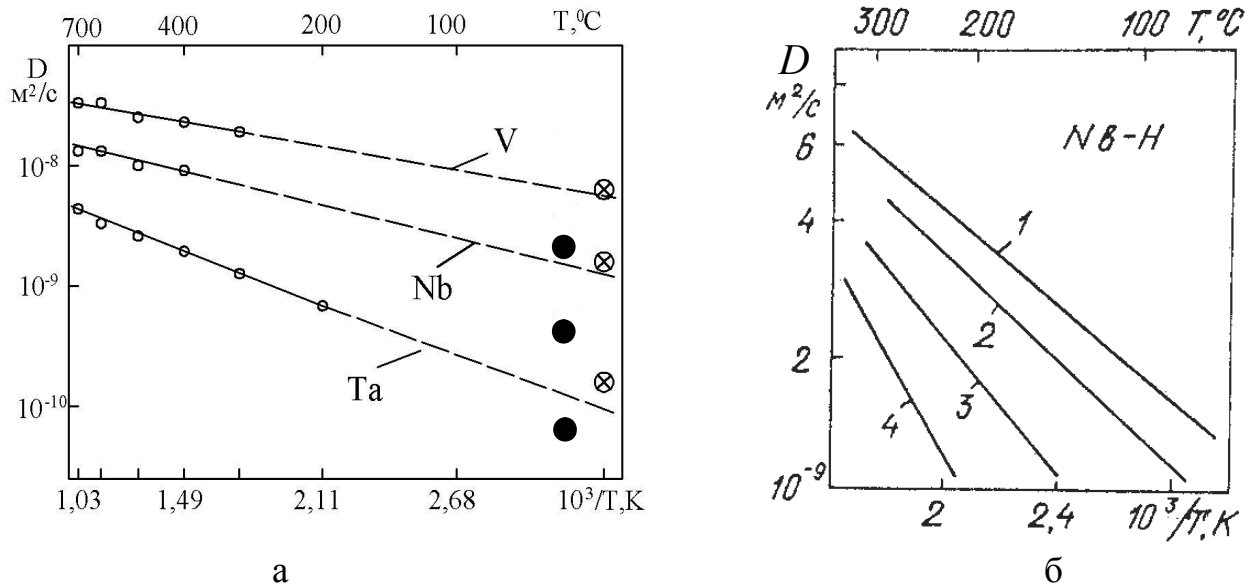


Рис. 3. Політерми коефіцієнта дифузії водню в металах V групи (а) та у ніобії [4] залежно від концентрації водню (б). 1 – α -фаза; 2 – 7,0; 3 – 25,4; 4 – 40,4 % H/Nb .

- [1] Похмурський В.І., Федоров В.В. Вплив водню на дифузійні процеси в металах.- Львів: ФМІ НАНУ, 1998.- 208 с.
- [2] Федоров В.В., Соколовский О.Р., Похмурский В.И. Применение метода электропроводности для определения коэффициента диффузии водовода в металах.- Львов, 1987.- 34 с.- (Препр./ АН УССР. Физ.-мех. ин-т; № 121).
- [3] Veleskis E., Edwards R.K. Thermodynamic properties in the systems Vanadium-Hydrogen, Niobium-Hydrogen, Tantalum-Hydrogen // J. Phys. Chem.- 1969.- 73.- p. 683-692.
- [4] Водород в металлах / Под ред. Г.Алефельда и Н.Фелькля.- М.: Мир, 1981.-Т.1.- 475 с.; Т.2.- 430 с.
- [5] Катлинский В.М. Некоторые закономерности и параметры процесса диффузии водорода в десяти переходных металлах // Изв. АН СССР. Неорг. материалы.- 1978.- 14.- №9.- С. 1667-1673.

ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ МІКРОКРИСТАЛІВ $\text{BaCl}_2\text{-Eu}$, ВКРАПЛЕНИХ В МАТРИЦЮ NaCl

Пушак А.С.¹, Вістовський В.В.², Мягкота С.В.³, Волошиновський А.С.²,
Демків Т.М.², Антоняк О.Т.², Пашук І.П.²

¹Українська академія друкарства, м. Львів,

²Львівський національний університет імені Івана Франка,

³Львівський національний аграрний університет,

e-mail: vistovskii@physics.wups.lviv.ua

Останнім часом значну увагу привертають монокристали галоїдів лужноземельних металів типу MeX_2 , ($\text{Me}=\text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$; $\text{X}=\text{Cl}, \text{I}$), активовані іонами рідкісноземельних елементів, з огляду на перспективу створення ефективних сцинтиляційних матеріалів [1–4]. Однак, досить сильна гігроскопічність цих кристалів перешкоджає їх детальному дослідженню і практичному застосуванню. Цей недолік можна усунути, досліджуючи мікрочастинки $\text{MeX}_2\text{-Eu}$, вкраплені в діелектричну матрицю. Метою цієї роботи були синтез мікрочастинки $\text{BaCl}_2\text{-Eu}$, вкраплені у матрицю NaCl , та вивчення їх люмінесцентних властивостей при збудженні в області внутрішньцентрового поглинання іонів Eu^{2+} та в області зона-зонних переходів матриць.

Кристали $\text{NaCl-BaCl}_2(1 \text{ мол.}\%)\text{-EuCl}_3(0.02 \text{ мол.}\%)$ та $\text{BaCl}_2\text{-Eu}(0.1 \text{ мол.}\%)$ були вирощені у вакуумованих кварцових ампулах методом Стокбаргера. Після синтезу кристали $\text{NaCl-BaCl}_2\text{-Eu}$ відпалювались при температурі 150-200°C на протязі 100 год. для стимулювання процесів агрегування.

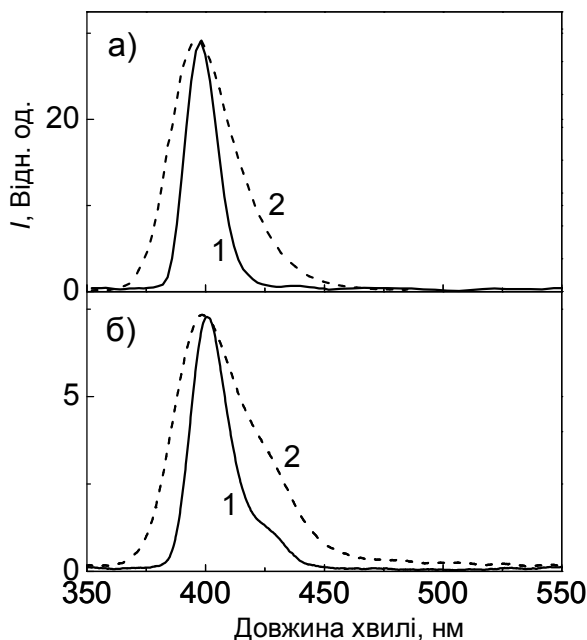


Рис. 1. Спектри люмінесценції кристалів: а) $\text{BaCl}_2\text{-Eu}$; б) $\text{NaCl-BaCl}_2\text{-Eu}$, ($\lambda_{\text{exc}}=290 \text{ нм}$) при $T=10$ (криві 1) і 295 К (криві 2).

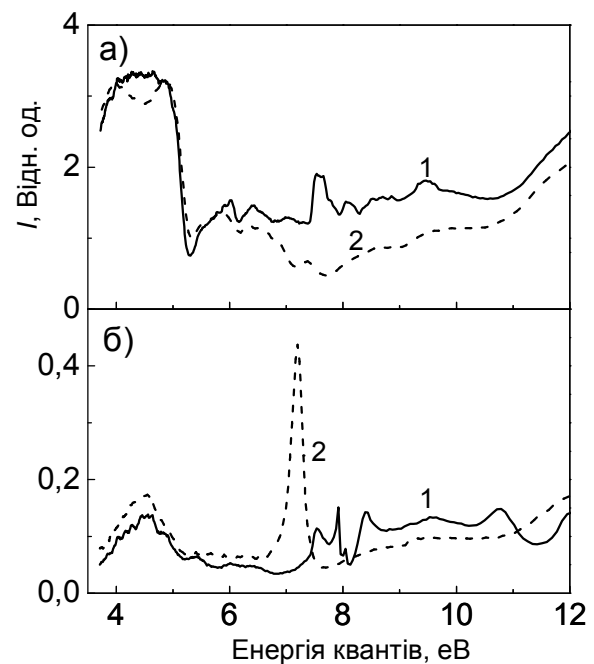


Рис. 2. Спектри збудження смуги люмінесценції з $\lambda_{\text{max}}=396 \text{ нм}$ кристалів: а) $\text{BaCl}_2\text{-Eu}$; б) $\text{NaCl-BaCl}_2\text{-Eu}$ при $T=10$ (криві 1) і 295 К (криві 2).

Смуга люмінесценції європейських центрів у кристалі $\text{NaCl-BaCl}_2\text{-Eu}$ розміщена в області 396 нм і спектрально збігається зі смугою люмінесценції європейських центрів в кристалі $\text{BaCl}_2\text{-Eu}$ (рис. 1). Також спектрально збігаються смуги поглинання іонів Європію ($4f\text{-}5d$ переходи в околі 3,8 – 5,2 еВ) в кристалах $\text{NaCl-BaCl}_2\text{-Eu}$ та $\text{BaCl}_2\text{-Eu}$ (рис. 2).

Ці дані поряд з даними зондового електронного аналізу, здійсненого за допомогою скануючого електронного мікроскопа (JEOL JSM-T220A), дають змогу стверджувати, що у кристалічній системі $\text{NaCl-BaCl}_2\text{-Eu}$ утворюються мікрочастинки $\text{BaCl}_2\text{-Eu}$, дисперговані у матриці NaCl . Свічення, яке спостерігається в області 430 нм кристала $\text{NaCl-BaCl}_2\text{-Eu}$ (рис. 1б), відносять до випромінювання іонів Європію, які входять до складу одиночних диполів $\text{Eu}^{2+}\text{-v}_c^-$ або їх агрегатів (димерів, тримерів) в матриці NaCl [5].

У випадку збудження люмінесценції кристала $\text{NaCl-BaCl}_2\text{-Eu}$ рентгенівськими квантами з енергією 40 кеВ в спектрах люмінесценції як і у випадку оптичного збудження спостерігаються смуги з $\lambda_{\text{max}}=396$ і 428 нм (рис. 3). Однак, при рентгенівському збудженні смуга люмінесценції з $\lambda_{\text{max}}=428$ нм, що відповідає випромінюванню Європію в матриці NaCl , є переважаючою за інтенсивністю (рис. 3, крива 1). Наявність смуги з $\lambda_{\text{max}}=396$ нм в спектрі рентгенолюмінесценції свідчить про те, що вже в процесі росту кристала утворюються мікрочастинки BaCl_2 , активовані іонами Європію. Додатковий тривалий відпал кристала сприяє процесам агрегатизації домішкових іонів з утворенням домішкових мікрочастин $\text{BaCl}_2\text{-Eu}$. Внаслідок цього в спектрі рентгенолюмінесценції домінує смуга з $\lambda_{\text{max}}=396$ нм (крива 2), що свідчить про переважаюче входження іонів Європію в мікрочастинки BaCl_2 .

В процесі відпалу зразка протягом трьох діб при $T=600^\circ\text{C}$ і гартуванні до кімнатної температури відбувається руйнування значної кількості мікрочастин з вивільненням іонів Європію. Таким чином відбувається збільшення концентрації іонів Європію в матриці NaCl , натомість зменшується як кількість, так і розміри мікрочастин BaCl_2 . Відповідно в спектрі рентгенолюмінесценції кристала $\text{NaCl-BaCl}_2\text{-Eu}$ спостерігається збільшення інтенсивності смуги з $\lambda_{\text{max}}=428$ нм відповідальної за люмінесценцію іонів Європію в матриці NaCl (рис. 3, крива 3).

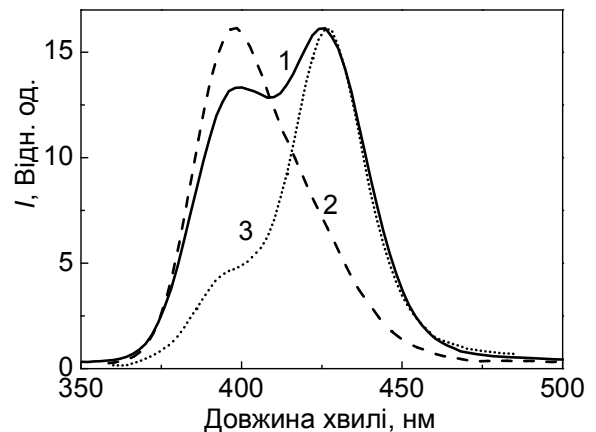


Рис. 3. Спектри рентгенолюмінесценції кристалів $\text{NaCl-BaCl}_2\text{-Eu}$ (після синтезу - крива 1, відпаленого - крива 2, загартованого від 600°C до кімнатної температури - крива 3).

Кінетика загасання смуги люмінесценції з $\lambda_{\max}=396$ нм кристалу NaCl-BaCl₂-Eu при збудженні рентгенівськими квантами (T=295K) характеризується постійною часу 390 нс, що узгоджується з результатами, одержаними в роботі [6] для монокристала BaCl₂-Eu. Таким чином, це додатково підтверджує приналежність смуги люмінесценції з $\lambda_{\max}=396$ нм кристалу NaCl-BaCl₂-Eu до випромінювання мікрокристалів BaCl₂-Eu, вкраплених в матрицю NaCl.

- [1] Cherepy N.J., Hull G., Drobshoff A.D., Payne S.A., van Loef E., Wilson C.M., Shah K.S., Roy U.N., Burger A., Boatner L.A., Choong W.S., Moses W.W. // Appl. Phys. Lett. 92, 083508 (2008).
- [2] Cherepy N.J., Payne S.A., Asztalos S.J., Hull, G., Kuntz J.D., Niedermayr T., Pimputkar S., Roberts J.J., Sanner R.D., Tillotson T.M., van Loef E., Wilson C.M., Shah K.S., Roy U.N., Hawrami R., Burger A., Boatner L.A., Woon-Seng Choong, Moses W.W. // IEEE Transactions on Nuclear Science 56, 873 (2009).
- [3] van Loef E.V., Wilson C.M., Cherepy N.J., Hull G., Payne S.A., Woon-Seng Choong, Moses W.W., Shah K.S. // IEEE Transactions on Nuclear Science 56, 869 (2009).
- [4] Реброва Н.В., Пономаренко Т.В., Чергинец В.Л., Косинов Н.Н., Трефилова Л.Н., Зеленская О.В.// Тезиси докладов. Международная конференция “Инженерия сцинтилляционных материалов и радиационные технологии”, Харьков, Украина, 2008, С.82.
- [5] Ossypuan Yu.A., Morgunov R.B., Baskakov A.A., Shmurak S.Z., Tanimoto. Y. // Phys. Stat. Sol. (a) 201, 148 (2004).
- [6] Selling J., Birowosuto M.D., Dorenbos P., Schweizer S. // Journ. Appl. Phys. 101, 034901 (2007).

ДОСЛІДЖЕННЯ ПОВЕРХНІ (100) ШАРУВАТИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛІВ In_4Se_3 МЕТОДАМИ СКАНУЮЧИХ ТУНЕЛЬНИХ МІКРОСКОПІІ ТА СПЕКТРОСКОПІІ

Дверій О.Р., Галій П.В.

Львівський національний університет імені Івана Франка,
e-mail: abiturient@bigmir.net

Шаруваті кристалічні структури із сильною ковалентно-іонною взаємодією всередині шару та слабким Ван-дер-Ваальсівським зв'язком між шарами є об'єктами сучасних досліджень, даючи нові можливості розуміння властивостей низькорозмірних (2D) та ланцюжково-подібних структур і їх потенційного технологічного застосування. Особливістю міжшарової поверхні сколювання (ПС) (100) In_4Se_3 у порівнянні з іншими шаруватими напівпровідниковими кристалами є борознистий і ланцюжково подібний її рельєф. Для дослідження структури та топографії ПС (100) кристалів In_4Se_3 використані методи дифракції повільних електронів (ДПЕ) та скануючої тунельної мікроскопії (СТМ), а метод скануючої тунельної спектроскопії (СТС) – для отримання поверхневої локальної електронно-енергетичної структури і якісних характеристик локальної густини електронних станів.

Для ПС, отриманих у надвисокому вакуумі (НВВ) виявлено періодичні борознисті структури [1], які співмірні з постійними ґратки, що отримані дифракцією X-променів (рентгено-структурним аналізом). Результати ДПЕ та СТМ вказують на те, що борозниста та ланцюжковоподібна поверхнева структура (100) In_4Se_3 є стабільною, тобто ПС не перебудовується при тривалих експозиціях у НВВ і може бути застосована як анізотропна, слабо провідна матриця для створення поверхневих провідних нанодотів або наноструктур.

Результати СТМ/СТС вказують на можливу локальну фазову неомогенність та енергетичну неоднорідність сколів (100) In_4Se_3 . Деякі локальні точки на поверхні розміром $\cong 10 \text{ \AA}$ показують як нелінійні ВАХ – I_T-V , властиві для напівпровідникових поверхонь, так і металоподібні лінійні ВАХ, вказуючи про можливі кластери металу In на ПС (див. рис. 1). Проте, усереднення по невеликих ділянках площі $13 \times 8,5 \text{ нм}^2$, вибраних на ПС, дає I_T-V характеристики, притаманні напівпровідникам. Диференційовані спектри dI_T/dV від напруги зміщення V є функцією енергії і є пропорційними до локальної густини станів – $N_S(E)$.

Методом СТС отримано величину зонної щільності $\sim 0,65 \text{ eV}$, що вказує, в цілому, на напівпровідникову природу поверхні (100) In_4Se_3 і, також, можна виявити присутність поверхневих станів біля стелі валентної зони. Одержана величина зонної щільності для поверхонь сколювання In_4Se_3 (n -тип провідності, $n \cong 5 \times 10^{15} - 10^{17} \text{ см}^{-3}$, при 300 К) добре узгоджується з величиною зонної щільності для об'єму шаруватого напівпровідникового кристалу In_4Se_3 $E_g \cong 0,62 - 0,67 \text{ eV}$, отриманої іншими експериментальними та теоретичними методами [2]. Зокрема, таке співпадіння корелює із стабільністю та відсутністю реконструкції поверхневої структури (100) In_4Se_3 після сколювання та експозиції у НВВ.

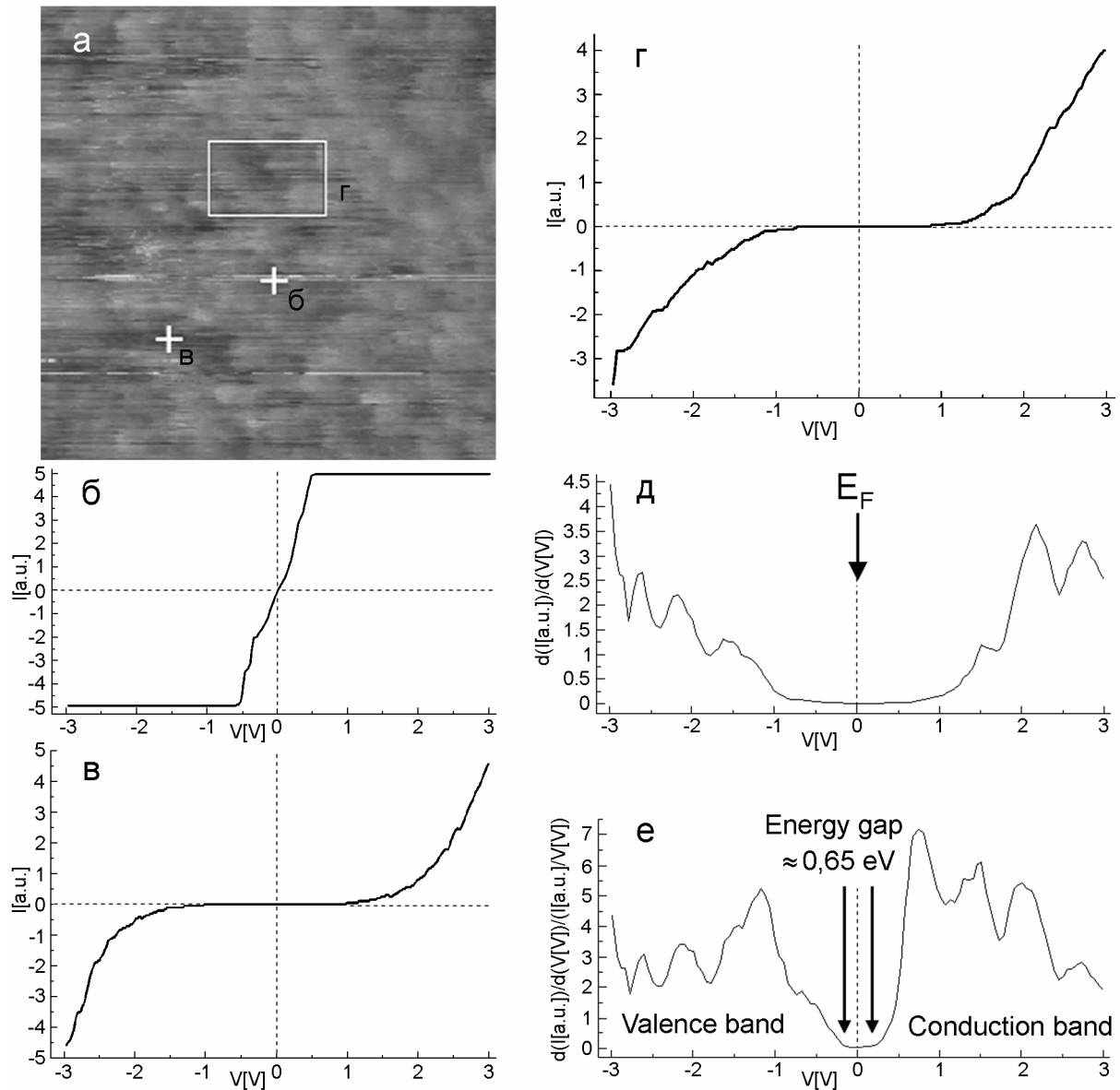


Рис.1. СТМ/СТС дослідження НВВ сколу поверхні (100) In_4Se_3 : **а)** СТМ зображення розміром $50 \times 50 \text{ nm}^2$; **(б, в)** – локальні $I=f(V)$ криві, виміряні у різних точках в межах зображення розміром $50 \times 50 \text{ nm}^2$: **б)** $I-V$ крива, виміряна в точці, відміченій хрестиком на Рис. 1а, характерна для металу; **в)** напівпровідникова $I-V$ крива; **г)** типові $I=f(V)$ криві як результат усереднення у позначеній прямокутником ділянці на Рис. 1а (усереднені $I=f(V)$ криві для 100 точок); **д)** диференційовані просторово усереднені dI/dV спектри; **е)** пронормовані dI/dV спектри.

В цілому, спостережувана періодична борозниста структура незначно відрізняється по всій досліджуваній поверхні, що можна побачити із Фур'є-фільтрації зображень. Однак, спостерігається зростання періодів в борознистих структурах у напрямі нормальному до ланцюжків, переходячи від сколів одержаних у НВВ до свіжих поверхонь сколювання, одержаних на повітрі із зникненням періодичних структур при тривалих експозиціях сколів на повітрі.

[1] Galiy P.V., Ciszewski A., Dveriy O.R. et al. // *Func. Materials*, **16**, 279 (2009).

[2] Sznajder M., Rushchanskii K.Z., Kharkhalis L.Yu. et al. // *Phys. Stat. Sol.* **B243**, 592, (2006).

ОСОБЛИВОСТІ КОНТАКТІВ МЕТАЛ – ФТОРОПЛАСТОВА МАТРИЦЯ З ВУГЛЕЦЕВИМИ НАНОТРУБКАМИ.

Ржешевська О.

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

При наноструктуруванні матеріали можуть набувати нових властивостей та незвичайних характеристик. Важливими наноструктурами з широким спектром використання є вуглецеві нанотрубки (ВНТ). Завдяки своїм унікальним властивостям (в тому числі емісійні, електронні, пружні) [1] ці об'єкти мають значні потенційні можливості технічного застосування, наприклад, як елементи комп'ютерів, як перетворювачі механічного руху в електричний сигнал при різних зовнішніх впливах.

Дана робота присвячена дослідженню механічної міцності електричних контактів до зразків із фторопласту-4 та композитного матеріалу із фторопласту-4 з вуглецевими нанотрубками; вивченню мікрорельєфу поверхні контактів; складу поверхні контактів на електронному мікроскопі; оцінці механічної міцності контактів при дії лазерних ударних хвиль з тиском до 1ГПа.

Дослідження проводились на зразках у вигляді шайб різного діаметра і товщини (діаметром 15мм., 30мм., товщиною 1.1, 1.3, 1.7, 2.1мм).

Для визначення сили зчеплення металевого покриття з фторопластовою підкладкою застосовувався метод відриву відповідно до ГОСТу 15140 -78.

Випробування показали, що створені на чистому фторопласті контакти на основі міді витримують навантаження на відрив в статичному режимі 4МПа. Перевірка якості контактів за допомогою загальноприйнятої в промисловості методики випробування – нанесенням сітки подряпин. Якість контактів зразків фторопласта з вуглецевими нанотрубками є вищою, ніж контактів отриманих на зразках фторопласта без ВНТ при тих самих умовах нанесення та випробування, якість контактів залежить також від складу електроліту.

Вивчення складу та рельєфу металевого контакту та перехідного шару контакт - поверхня фторопластової матриці з ВНТ до і після відриву контакту при проведенні експериментів на міцність та хімічний склад нанесеного покриття здійснювалось на електронному мікроскопі РЕМ-106М з приставкою для визначення хімічного складу матеріалу. Нанесений металевий шар включає в себе 92,87% міді, 3,75% кисню, 3,14% вуглецю, 0,18% олова, 0,05% хлору.

Із фрактограми зрізу контакту металеве покриття - фторопластова матриця з ВНТ визначено, що покриття є однорідним, рівномірним по товщині, без помітних макропор. Поверхня повторює напрямки ліній, утворених при первинній обробці. Вивчення фрактограми поверхні зразка після відриву основного шару мідного покриття після багаторазової дії лазерної ударної хвилі показали, що в області переходу покриття – фторопластова основа пори на поверхні зразка і місця заглибин, утворених внаслідок абразивної обробки поверхні, заповнені металом і служать замками та центрами кристалізації для первинного осідання атомів металічного покриття. Поверхня фторопластової

матриці з вуглецевими нанотрубками на ділянці зразка, де мідь не наносилась, має лускоподібний характер. Вона складається із світлих та темних (на більшій глибині) областей. Свічення окремих ділянок (до 20 – 30 мкм) пов’язане із стіканням заряду на гранях шаруватих лусок, розташованих на поверхні.

Експерименти по впливу лазерних ударних хвиль показали, що: контакти витримують навантаження в динамічному режимі на стискання більше 1,5 ГПа, а при динамічному розвантаженні – за оцінками на основі формул з врахуванням процесів багаторазового відбивання - до 0,9 ГПа. Електричний сигнал, що виникає внаслідок проходження лазерної ударної хвилі є у 1,5 рази більшим за амплітудою та відрізняється за формою від сигналу, що спостерігається при опроміненні чистого фторопласту. Величина сигналу залежить від товщини зразка і кількості пострілів. Отримані у роботі результати вказують на можливість створення індикаторів імпульсного тиску на таких матеріалах.

[1] Нанорозмірні системи. Будова - властивості – технології // Тези конференції НАНСИС 2007 (21 – 23 листопада 2007, Київ, Україна). – 628 с.

ВІДНОСНИЙ ВІДГУК ГЕТЕРОСТРУКТУР Al-(n-Sn₂)-p-Si-Al НА ЗМІНУ ГАЗОВОГО СЕРЕДОВИЩА

Гуль Р.В.

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

e-mail: RusGul@gmail.com

Сучасний рівень технічного розвитку супроводжується ростанням масштабів застосування різноманітних технологій, які негативно впливають на оточуюче середовище. Цей чинник визначає необхідність точного якісного та кількісного контролю параметрів різноманітних матеріалів і середовищ. Газова сенсорика невід’ємно пов’язана з даними проблемами, оскільки саме вона призначена для аналізу параметрів газоподібних сполук. В сучасній електроніці широко використовують напівпровідникові матеріали і багатошарові структури, на основі яких будуються напівпровідникові пристрої та мікросхеми. Зараз важливим є питання подальшого удосконалення технології виготовлення напівпровідникових пристроїв із підвищенням ефективності лабораторного та промислового контролю їх якості.

У роботі з вивчення гетероструктур Al-(n-Sn₂)-p-Si-Al із проміжним нанощаром n-SnO₂ з масовою товщиною шару диоксиду олова 20 нм. показано, що вольтамперні й вольтфарадні характеристики в газовому середовищі змінюють свої параметри при зміні лабораторного середовища на середовище газів хлору та водню. Ми пропонуємо для визначення складу газу використовувати нелінійну вольтамперну характеристику гетеропереходів адсорбційно-активна плівка – напівпровідник. Енергетична діаграма гетероструктури розглядається в апроксимації Шоттки через високу питому провідність плівки SnO₂. Відгук вольтамперних характеристик на зміну середовища залежить від зміни висоти потенціального бар’єру гетеропереходу та від зміни спаду напруги на адсорбційно-активній наноплівці n-SnO₂. В свою чергу зміна висоти потенціального бар’єру залежить від зміни величини й знаку заряду на адсорбційно-активній наноплівці при зміні газового середовища. Зміна напруги на адсорбційно-активній наноплівці визначається як зміною напруги на самій плівці, так і зміною спадання напруги на поверхневих станах.

У роботі вивчалися гетероструктури n- SnO₂-p-Si з адсорбційно-активною наноплівкою (n- SnO₂) товщиною 20 нм нанесеною методом спреї технології на p-Si підкладку. Отримані та досліджені вольтамперні та вольтфарадні характеристики гетероструктури в лабораторному середовищі та середовищах хлору та водню. Розглянуто відносний відгук вольтамперних характеристик гетероструктур при зміні лабораторного середовища на інше газове середовище [2]:

$$\gamma = (I_v - I_g) / I_v \quad (1),$$

де I_v , I_g - струми в лабораторному й газовому середовищі при рівних напругах прикладених до гетеропереходу, відповідно. Відгук величини струму через діод має різний знак для розглянутих газів та різну нелінійну залежність від прикладеної напруги.

Висота потенціального бар'єру змінюється як при вимірюванні вольтамперних так і вольтфарадних характеристик. Збільшення висоти потенціального бар'єру при нульовій прикладеній до гетеропереходу напрузі викликається адсорбцією молекул газу, відповідає формуванню додаткового негативного для хлору і позитивного для водню заряду на адсорбційно-активній наноплівці n- SnO₂.

Таким чином, із отриманих результатів можна зробити наступні висновки. Вольтамперні та вольтфарадні характеристики гетероструктури Al-(n- Sn₂) – p – Si – Al з масовою товщиною плівки n- Sn₂ 20нм, різні при їхньому вимірюванні в лабораторній атмосфері та в атмосферах газів хлору та водню. Ці плівки можуть бути використані як складові елементи газових сенсорів. Відгук вольтамперних характеристик при зміні навколишнього середовища визначається зміною висоти потенціального бар'єру гетеропереходу та зміною спаду напруги на наноструктурованій адсорбційно активній плівці. Запропонований аналіз висоти потенціального бар'єру та спаду напруги на адсорбційно активній наноплівці дозволяє визначити знак адсорбованого заряду та його величину при зміні навколишнього газового середовища від лабораторної атмосфери до газів хлору та водню. Це може бути використано як додаткові параметри селективного аналізу газових сумішей.

[1] Vikulov V.A., Strikha V.I., Skryshevsku V.A., Kilchitskaya S.S., E. Souteyrand,

J - R Martin. Electrical features of the metal-thin porous silicon-silicon structure.

Journal of physics. D: Appl. Physics 33 (2000) 1957-1964.

[2] С. С. Галак, В. В. Ильченко, А. М. Кордубан, А. П. Шпак, А. В. Ющенко // Вплив аміаку на електрофізические характеристики контактів (In₂O₃+ 5%Sn) – (p – Si) // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. Збірник наукових праць т.2 випуск 4. - Київ, 2004. - с. 1121-1129.

[3] A. Mandelis, C. Christofide, Chem. Anal. (New York) 125 (1993) 19.

[4] J.W. Gardner, P.N. Barlett (Eds.), Sensors and Sensory Systems for an Electronic Nose, NATO ASI Series 212, Kluwer, Dordrecht, The Netherlands, 1992.

[5] K. Ihokura, J. Watson, The stannic oxide gas sensors, in: Principle and Applications, CRC Press, Boca Raton, 1994.

[6] K.J. Albert, N.S. Lewis, C.L. Schauer, G.A. Sotzing, S.E. Sitzel, T.P. Vaid, D.R. Walt, Chem. Rev. 100 (2000) 2595.

[7] S. Nakata, H. Okunishi, Applied Surface Science 240 (2005) 366–374.

АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК

Антоняк О.Т.	48	Кушнір К.М.	38
Басістий П.В.	44	Лісний Б.М.	14
Бачинський Ю.Г.	44	Луньов С.В.	42
Бурий О.М.	38	Маньовська О.А.	30
Вістовський В.В.	48	Маханець О.	11
Волошиновський А.С.	48	Мисакович Т.С.	10
Галій П.В.	51	Михалик Д.М.	28
Гуль Р.В.	55	Мохун С.В.	44
Гуменюк Й.А.	17	Мягкота С.В.	48
Дверій О.Р.	51	Никируй Л.І.	35
Дзумедзей Р.О.	37	Пашук І.П.	48
Демків Т.М.	48	Пушак А.С.	48
Довганюк М.	11	Ржешевська О.	53
Дрогобицький Ю.В.	24	Скоренький Ю.Л.	8, 24
Ковальчук І.М.	38	Токарчук М.В.	17
Коменда Т.І.	40	Федосов А.В.	40, 42
Коровицький А.М.	40	Федосов С.А.	42
Кравченко В.М.	6, 38	Цюпак Н.	11
Крамар О.І.	8, 24	Ящук В.М.	6, 38
Куницька Л.Ю.	22		

ЗМІСТ

ПРОГРАМА СЕМІНАРУ	3
В.М. Кравченко, В.М. Яшук УКРАЇНСЬКЕ ФІЗИЧНЕ ТОВАРИСТВО: ІСТОРІЯ, ДОСЯГНЕННЯ, ПРОБЛЕМИ Й ПЕРСПЕКТИВИ	6
О.І. Крамар, Ю.Л. Скоренький ВПЛИВ ФОРМИ МОДЕЛЬНОЇ ГУСТИНИ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ НА ЕЛЕКТРИЧНІ ТА МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ ВУЗЬКОЗОННИХ МАТЕРІАЛІВ	8
Т.С. Мисакович МОДЕЛІ БОЗЕ- ТА БОЗЕ-ФЕРМІ-ХАББАРДА ПРИ СКІНЧЕННИХ ТЕМПЕРАТУРАХ	10
О. Маханець, М. Довганюк, Н. Цюпак ЕКСИТОННИЙ СПЕКТР МАСИВУ ШЕСТИГРАННИХ НАНОТРУБОК З ВРАХУВАННЯМ ЕКСИТОН-ФОНОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ	11
Б.М. Лісний МАГНІТНІ І ТЕПЛОВІ ВЛАСТИВОСТІ СПІН-1/2 ДИСТОРСНОГО РОМБІЧНОГО ЛАНЦЮЖКА ІЗІНГА-ГАББАРДА	14
Й.А. Гуменюк, М.В. Токарчук ПРО ФОРМУ РІВНЯННЯ БАЛАНСУ ДЛЯ ГУСТИНИ КІНЕТИЧНОЇ ЕНЕРГІЇ У КІНЕТИЧНІЙ ВАРІАЦІЙНІЙ ТЕОРІЇ	17
Л.Ю. Куницька ВПЛИВ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО ПОЛЯ НА НАНОСТРУКТУРНІ СИСТЕМИ ТА ДИСПЕРСНІ СЕРЕДОВИЩА	22
Ю.Л. Скоренький, О.І. Крамар, Ю.В. Дрогобицький КОНФІГУРАЦІЙНІ ПРЕДСТАВЛЕННЯ МОДЕЛЕЙ НАНОСТРУКТУРНИХ НИЗЬКОВИМІРНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СИСТЕМ	24
Д.М. Михалик ПАРАМЕТРИЧНА ІДЕНТИФІКАЦІЯ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ МАСОПЕРЕНОСУ В НЕОДНОРІДНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ	28
О.А. Маньовська КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ВНЕСЕННЯ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК В МАТЕРІАЛ ПІД ДІЄЮ ЛАЗЕРНИХ УДАРНИХ ХВИЛЬ	30

Л.І. Никируй ТРАНСПОРТНІ ЯВИЩА У ТВЕРДИХ РОЗЧИНАХ НА ОСНОВІ СПОЛУК IV-VI	35
Р.О. Дзумедзей КІНЕТИЧНІ ЯВИЩА У ЛЕГОВАНИХ ІНДІЄМ КРИСТАЛАХ НА ОСНОВІ PbTe	37
В.М. Кравченко, О.М. Бурий, І.М. Ковальчук, В.М. Ящук, К.М. Кушнір АУТОФЛУОРЕСЦЕНЦІЯ БІОЛОГІЧНИХ ТКАНИН ТА ЇЇ ВИКОРИСТАННЯ ДЛЯ ДІАГНОСТИКИ РАКОВИХ ЗАХВОРЮВАНЬ	38
А.В. Федосов, Т.І. Коменда, А.М. Коровицький МОРФОМЕТРИЧНИЙ АНАЛІЗ РОЗПОДІЛУ МІКРОЧАСТОК КАРБІДУ КРЕМНІЮ ДЕПОНОВАНОГО НА Fe/NiP	40
А.В. Федосов, С.В. Луньов, С.А. Федосов ВПЛИВ ГЛИБОКИХ ЕНЕРГЕТИЧНИХ РІВНІВ НА П'ЄЗООПІР $n - Si$	42
С.В. Мохун, Ю.Г. Бачинський, П.В. Басістий ВИЗНАЧЕННЯ КОЕФІЦІЄНТУ ДИФУЗІЇ ВОДНЮ В ГІДРИДОТВІРНИХ МЕТАЛАХ	44
А.С. Пушак, В.В. Вістовський, С.В. Мягкота, А.С. Волошиновський, Т.М. Демків, О.Т. Антоняк, І.П. Пашук ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ МІКРОКРИСТАЛІВ $VaCl_2-Eu$, ВКРАПЛЕНИХ В МАТРИЦЮ NaCl	48
О.Р. Дверій, П.В. Галій ДОСЛІДЖЕННЯ ПОВЕРХНІ (100) ШАРУВАТИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛІВ In_4Se_3 МЕТОДАМИ СКАНУЮЧИХ ТУНЕЛЬНИХ МІКРОСКОПІЇ ТА СПЕКТРОСКОПІЇ	51
О. Ржешевська ОСОБЛИВОСТІ КОНТАКТІВ МЕТАЛ – ФТОРОПЛАСТОВА МАТРИЦЯ З ВУГЛЕЦЕВИМИ НАНОТРУБКАМИ.	53
Р.В. Гуль ВІДНОСНИЙ ВІДГУК ГЕТЕРОСТРУКТУР Al-(n-Sn ₂)-p-Si-Al НА ЗМІНУ ГАЗОВОГО СЕРЕДОВИЩА	55
АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК	57