

МАТЕРІАЛИ ІІ МІЖНАРОДНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ

**ФУНКЦІОНАЛЬНІ
МАТЕРІАЛИ
ДЛЯ ІННОВАЦІЙНОЇ
ЕНЕРГЕТИКИ**

Facing the future



FUNCTIONAL MATERIALS
for INNOVATIVE ENERGY



КИЇВ 2020

**FUNCTIONAL
MATERIALS FOR
INNOVATIVE ENERGY**

У збірці представлено програму і тези наукової конференції. Наведено основні результати експериментальних і теоретичних досліджень будови та властивостей функціональних матеріалів, самоорганізації їх структури, розробки методів одержання металів, сплавів, кераміки, композитів і напівпровідникових систем, в тому числі у наноструктурованому стані, вуглецевих наноматеріалів, плівок, покриттів і поверхневих систем, а також методів діагностики, атестації та моделювання функціональних матеріалів для інноваційної енергетики.

Для фахівців у галузі матеріалознавства, електрохімії, електроніки, наноелектромеханіки та енергетичної техніки; може бути корисною викладачам, аспірантам і студентам за спеціальністю «наноматеріали та нанотехнології», представникам державних і комерційних компаній, орієнтованих на сучасну, відновлювальну та екологічно чисту енергетику.

ТЕМАТИКА КОНФЕРЕНЦІЇ ФМІЕ-2020

- ❖ Новітні функціональні матеріали для інновації традиційних енергокомплексів
- ❖ Наноматеріали для розподіленої та автономної, у т.ч. відновлюваної, енергетики
- ❖ Інноваційні енергоефективні функціональні матеріали на основі надпровідних і магнітних структур
- ❖ Функціональні матеріали для інноваційних мереж енерготранспортування
- ❖ Інноваційні функціональні наноматеріали
- ❖ Нові методи дослідження та атестації матеріалів інноваційної енергетики
- ❖ Теоретичні та чисельні методи фізичного та хімічного матеріалознавства у сфері енергетики
- ❖ Неорганічні та органічні матеріали, у т.ч. живі організми, для енергетики й екології
- ❖ Проблеми та перспективи утилізації тепла

ПРОГРАМА КОНФЕРЕНЦІЇ

Новітні функціональні матеріали для інновацій традиційних енергокомплексів

1. О.М. Берднікова, А.В. Бернацький, В.Д. Позняков, В.М. Сидорець, Т.О. Алексеєнко, О.І. Бушма. Особливості структури лазерних та лазерно-дугових зварних з'єднань високоміцних сталей.
2. Дехтяренко В.А., Прядко Т.В., Саввакін Д.Г., Бондарчук В.І., Могильний Г.С. Процес гідридоутворення у гетерофазних сплавах системи Ti-Zr-Mn-V зі структурою фази Лавеса та ОЦК-твердого розчину.
3. Kosorukova T.A., Koval Yu.N., Odnosum V.V., Firstov G.S. The perspectives of shape memory alloys application in nuclear power engineering
4. Кайкан Л.С., Мазуренко Ю.С. Вплив заміщення іонів кобальту в літій-залізни нанорозмірні ферити на їх магнітні характеристики.
5. Никитенко Ю.О., Шаповалов В.О., Якуша В.В., Гніздило О.М., Жолудь В.В. Супервеликі монокристали вольфраму у вигляді пластин та тіл обертання.
6. Цареградська Т.Л., Плющай І.В., Козаченко В.В., Курилюк А.М., Розуван С.Г., Плющай О.І. Вплив ультразвукової обробки на мікромеханічні властивості аморфних сплавів.
7. Прядко Т.В., Дехтяренко В.А. Комплексний підхід до захисту титанових конструкцій від водневого окрихчення.
8. Яценко Л.М., Стебленко Л.П., Воронцова Л.О., Курилюк А.М. Модифікований епоксиретан як захисне покриття кремнієвих сонячних елементів.
9. Антоненко О.І., Косянчук Л.Ф., Бровко О.О., Безродна Т.В., Безродний В.І., Негрійко А.М. Поліуретани з інкорпорованими в них родаміновими барвниками як твердотільні лазерні елементи.
10. Плющай І.В., Горкавенко Т.В., Цареградська Т.Л., Каленик О.О., Плющай О.І. Першопринципне моделювання особливостей електронної структури композиту TiC-TiB₂
11. С.Ю.Максимов, О.О.Прилипка, О.М.Берднікова, Ю.А.Шепелюк. Оптимізація впливу зовнішнього електромагнітного поля на якість металу шва при зварюванні під водою.

Наноматеріали для розподіленої та автономної, у т.ч. відновлюваної, енергетики

12. Юсько Д., Качмар А., Годлевська М., Коцюбинський В.О., Бойчук В.М. Синтез, структурно-морфологічні та електрохімічні властивості ультрадисперсних оксидів молібдену.
13. I.F. Myronyuk, V. O. Kotsyubynsky, V.I. Chelyadyn, V.M. Boychuk, M. Hodlevskyi. Template synthesis, structure, morphology and electrochemical properties of mesoporous titania
14. Г.Ю. Михайлова. Особливості електропровідності наносистеми вуглецеві нанотрубки - метал.

Інноваційні енергоефективні функціональні матеріали на основі надпровідних і магнітних структур

15. V.B. Boledzyuk, Z.D. Kovalyuk, S.P. Yurcenyuk. Magnetic metal-carbon nanocomposite.
16. Frolova L., Pivovarov O, Hrydnieva T. Investigation of magnetic properties of Co-Mn-Zn ferrites obtained by contact low-temperature non-equilibrium plasma.
17. V. N. Antonov, D. A. Kukusta, S. V. Moklyak, D. V. Mazur, L. V. Bekenov. Electronic Structure and X-ray Magnetic Circular Dichroism in Ferroelectric CaMnTi₂O₆.

18. Носенко А.В., Кирильчук В.В., Бошко О.І., Євлаш І.К., Семирга О.М., Носенко В.К. Магнітом'які аморфні Со-сплави з низькою індукцією насичення.
19. Kasatkin A.L., Shapovalov A.P. Critical current in superconductor/ferromagnet thin film multilayers.
20. Kasatkin A.L., Shapovalov A.P. Vortex escape from the columnar pinning site in current-loaded anisotropic superconductor.
21. Шаповалов А.П., Житлухіна О.С. Від'ємна диференційна провідність n-типу в ВАХ надпровідних MoRe-Si(W)-MoRe гетероструктур
22. Шатернік В.Є., Суворов А.Ю., Шаповалов А.П. Надпровідникові переходи MoRe-Si(W)-MoRe в зовнішньому магнітному полі.
23. T. A. Prikhna, V. V. Romaka, V.E. Shaternik, M. Eisterer, A.V.Shaternik, V.E. Moshchil, A.P. Shapovalov, S.S. Ponomarov. Structure and functional properties of superconducting MgB₂-based materials.
24. М.О. Васильєв, В.К. Носенко, В.М. Шиванюк, І.В. Загорулько. Магнітомеханічні ефекти в аморфному сплаві Fe_{73,0}Cu₁Nb_{3,0}Si_{15,8}B_{7,2}.
25. Solovjov A. L., Omelchenko L. V., Petrenko E. V., Nazarova E., Buchkov K., Rogacki K. Features of excess conductivity and a possible pseudogap in FeSe superconductors.
26. Суворов О.Ю., Шаповалов А.П. Формування моноатомних шарів FeSe методом молекулярно-променевої епітаксії.
27. Kalenyuk A.A., Futimsky S.I., Kasatkin A.L., Shapovalov A.P. Power handling capability of microstrip fractal htsc resonator.

Інноваційні функціональні наноматеріали

28. M.S. Barabashko, D. Szewczyk, A. Jeżowski, M. Drozd, P. Gluchowski, M.I. Bagatskii, V.V. Sumarokov, A.N. Ponomarev, V.L. Kuznetsov, S.I. Moseenkov. Heat capacity, DSC and raman spectra of MWCNTS.
29. Ochkan K., Zhitlukhina E., Razmkhah S., Febvre P., Belogolovskii M. Charge current in metal/complex oxide memristors.
30. Rudenko E.M., Dyakin M.V., Korotash I.V., Polotsky D.Yu., Belogolovskii M.A. Low heat resistance heat transfer element based on aluminum nitride films for high power LEDs.
31. Filatov O.V., Soldatenko O.M. Mechanical properties of silver nanotubes and nanowires.
32. Ю. В. Горбатенко, О. О. Романцова, О. І. Кривчіков, О. О. Корольок. Особливості температурних залежностей теплопровідності молекулярних кристалів, що утворені лабільними молекулами.
33. Старокадомський Д.Л., Кохтич Л.М., М. Решетник, Д. Рассохін. Вплив наночасток магнетитів і феррооксидів на властивості нанокомпозитів на основі поліепоксидів.
34. Корнющенко Г.С., Шевченко С.Т., Наталіч В.В., Перекрыстов В.І. Формування багатшарових пористих наносистем Zn/ZnO і Zn/ZnO/NiO.
35. Перекрыстов В.І., Космінська Ю.О., Ганніч Ю.В., Корнющенко Г.С. Формування багатшарових композитних захисних покриттів на основі С, Al, Cr, Hf, Mo, Ta, Ti, W.
36. Перекрыстов В.І., Космінська Ю.О., Ганніч Ю. В. Структурування багаткомпонентних покриттів на основі Cr, Hf, Ti, Ta, W, Zr та вуглецю, сформованих розпиленням стрижневої складеної мішені.
37. Pavlenko O. L., Dmytrenko O. P., Gaponov A. M., Kulish M. P., Pundyk I.P., Kachkovsky O. D., Kurdiukov V. V., Lesiuk A.I., P.Kobzar. Spectral Peculiarities of Merocyanine Dyes Films.
38. Олексенко Л.П., Максимович Н.П., Матушко І.П., Федоренко Г.В., Луценко Л.В. Напівпровідникові наноматеріали Pd/SnO₂ для створення газових сенсорів
39. Корнющенко Г.С., Наталіч В.В., Шевченко С.Т., Перекрыстов В.І. Селективні процеси при формуванні пористих наносистем вуглецю.

40. Носенко В.К., Нізамєєв М.С. Дослідження впливу швидкості охолодження на термічну стійкість аморфного стану комплексно легованих сплавів на основі заліза.
41. Ochkan K., Belogolovskii M. Transport properties of layered ternary Transition-metal chalcogenides.
42. Петровська Д.Р., Котречко С.О., Тимошевський А.М., Стеценко Н.М. Вплив сили на висоту енергетичного бар'єру розриву карбінових ланцюжків.
43. Радченко Т.М., Татаренко В.А. Чутливість до деформацій і дефектів та їх комбінований вплив на електропровідність графену.
44. Rokytskyi M.O., Sichkar T.H., Shut M.I. Heat capacity features of PHTFE - SnO₂ nanocomposites.
45. Сербенюк Т.Б., Пріхна Т.О., Свердун В.Б., Свердун Н.В., Шаповалов А.П., Олійник В.В., Григорук В.І., Загородній В.В., Лаунець В.Л., Карпець М.В., Полікарпова Л.О. Нові композиційні матеріали на основі AlN для мікрохвильової електроніки.
46. Сербенюк Т.Б., Пріхна Т.О., Свердун В.Б., Свердун Н.В., Шаповалов А.П., Часник В.І., Карпець М.В., Марченко А.А., Полікарпова Л.О. Залежність електрофізичних властивостей від структури композитів AlN-Y₂O₃-C-Mo.
47. Шинкаренко О.В., Бекетов Г.В., Лінтуга А.І. Хімічна модифікація поверхні полістиролових наноплівки.
48. Солнцев В.П., Назаренко В.А., Солнцева Т.О., Васильківська М.А., Луговський Ю.Ф., Бродніковський М.П. Особливості технологічних, фізико-механічних і функціональних властивостей нанодисперсних реакційно-спечених нікелевих сплавів.
49. Сергій Котречко, Андрій Тимошевський, Євген Колівошко, Наталія Стеценко, Юрій Матвійчук. Фізика міцності і довговічності карбін графенових нанoelementів.
50. Раранський М.Д., Олійнич-Лисюк А.В., Курек І.Г., Тащук Р.Ю., Тащук О.Ю. Про інверсію знаку деформації в шарах In.
51. S.O. Zelinskyi, N.G. Stryzhakova, O.V. Gozhenko, A.Y. Maletin, Y.A. Maletin. Nanoporous carbon materials for high power supercapacitors.
52. Гаценко О.С., Засимчук О.Е., Турчак Т.В., Баскова О.І. Самоорганізація мікроструктури при пластичній деформації в нанокристалах металів з ГЦК та ОЦК ґраткою.
53. Zasimchuk E., Turchak T., Chausov N. Hydrodynamic plastic flow in metal materials.

Методи дослідження та атестації матеріалів інноваційної енергетики

54. Стеблянка П.О., Дьомічев.Е., Петров О.Д. Моделювання поведінки тіла з псевдопружно-пластичного матеріалу при нестационарному навантаженні.
55. E.G. Len, V.V. Lizunov, T.D. Shatnii, M.V. Ushakov, T.S. Len, E.A. Tsapko. Peculiarities of electronic structure and positron spectroscopy of magnetic binary alloys.
56. Лізунов В.В., Молодкін В.Б., Владімірова Т.П., Решетник О.В., Василик Я.В., Куліш М.П., Дмитренко О.П., Павленко О.Л. Вплив ефектів багатократності розсіювання випромінювання на формування фазоконтрастних зображень некристалічних об'єктів.
57. Васильєв М.О., Лень Є.Г., Макеєва І.М., Колесник В.М., Шевченко М.Я., Смольник С.В. Зміни електронного стану поверхні монокристалу W (110) після термічної та йонної обробки.
58. E.A. Tsapko, I.Ye. Galstian. Diagnostics of structural defects and electronic properties of carbon nanotubes by positron annihilation.
59. Ющенко К.А., Яровицин О.В., Звягінцева Г.В., Черв'яков М.О., Волосатов І.Р., Олійник Ю.В. Формування комплексу вимог до методик оцінки роботоздатності зварних

з'єднань «основний-наплавлений метал» нікелевих жароміцних сплавів типу ЖС6 та ЖС32, що імітують відновлення кромки лопаток авіаційних ГТД в промислових умовах.

**Неорганічні та органічні матеріали, у т.ч. живі організми,
для енергетики й екології**

- 60. *Frolova L.A.* Investigation of the process precipitation of Fe-Co layered double hydroxides.
- 61. *Moklyak V.V., Hrubciak A.B., Ostafyichuk B.K., Chelyadyn V.L.* «Biopolimer batteries» - a new concept for environment friendly & safer energy storage.
- 62. *Ivanov O.V., Voronkov E.O., Kiose D.F., Tiron-Vorobiova N.B.* To the question of the constructive solution of the ballast water management system based on the DI NU "OMA"
- 63. *Shumeiko M.S., Sharkevych M.S., Ryabokon V.I., Danylyan A.G.* Testing of fuel catalyst «fuel well» onboard.

Проблеми та перспективи утилізації тепла

- 64. *Kulahin E.O., Skorobrekha I.I., Maslova D.I. Naydyonov A.I* Defining optimization approaches to the process of deep utilization of marine diesel heat.

Особливості структури лазерних та лазерно-дугових зварних з'єднань високоміцних сталей

**О.М. Берднікова*, А.В. Бернацький, В.Д. Позняков, В.М. Сидорець,
Т.О. Алексеєнко, О.І. Бушма**

Інститут електрозварювання ім. Є.О.Патона НАН України

**Тел.: +38 0442052563 E-mail: [*omberdnikova@gmail.com](mailto:omberdnikova@gmail.com)*

Найчастіше при виготовленні металоконструкцій відповідального призначення використовують механізоване або автоматичне зварювання в середовищі захисних газів. При цьому використовують такі режими зварювання, які б дозволили забезпечити високу продуктивність, необхідний комплекс механічних властивостей та тріщиностійкість зварних з'єднань. Останнім часом впроваджуються технології лазерного та гібридного лазерно-дугового зварювання, що дає змогу отримувати зварні з'єднання на підвищеній швидкості зі значно меншими розмірами швів та зони термічного впливу (ЗТВ), а також підвищити якість зварних з'єднань та продуктивність технологічного процесу.

В роботі застосовано комплексний підхід до фундаментальних та прикладних досліджень особливостей структурно-фазового складу металу зварних з'єднань високоміцних сталей (на прикладі низьколегованої сталі з 0,14%С) та закономірностей його впливу на фізико-механічні властивості цих з'єднань [1, 2]. Особливу увагу приділено з'ясуванню дії технологічних параметрів зварювання - швидкості зварювання ($V_{зв}$) та охолодження ($W_{6/5}$), а також способів зварювання (дугове, лазерне та гібридне лазерно-дугове). Показано, що при переході до швидкісних способів зварювання геометричні розміри зони зварювання (ширина швів та ЗТВ) зменшуються в 2...5 разів. З'єднання, виконані лазерним зварюванням, характеризуються найменшими розмірами цих зон.

На режимах лазерного зварювання високоміцної сталі зі збільшенням швидкості змінюються: фазовий склад металу зварних з'єднань від ферито-бейнітного до бейнітно-мартенситного при превалюванні об'ємної частки нижнього бейніту ($B_H = 50...60\%$); збільшується мікротвердість (HV); в кілька разів подрібнюється пакетна та субзеренна структура; формується переважно дрібнозерниста структура B_H в умовах рівномірного перерозподілу щільності дислокацій ($\rho = (8...9) \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$).

При гібридному лазерно-дуговому зварюванні зі збільшенням $V_{зв}$ фазовий склад металу швів та ЗТВ бейнітно-мартенситний, однак: зменшується об'ємна частка B_H (до 10...20%) при превалюванні бейніту верхнього ($B_B = 60...70\%$). Характерна наявність градієнтів: за розмірами структурних складових, HV, а також ρ . При формуванні структури B_B щільність дислокацій збільшується до $\rho = 1,5 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Найбільш рівномірний її розподіл ($\rho = (4...6) \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$) характерний для структури B_H .

При лазерному та гібридному лазерно-дуговому зварюванні високоміцних низьколегованих сталей запропоновано застосування режимів $V_{зв} = 50 \text{ м/год}$ ($W_{6/5} = 100^\circ \text{ C/c}$) та $V_{зв} = 72 \text{ м/год}$ ($W_{6/5} = 63^\circ \text{ C/c}$), відповідно. Отримані результати дозволять впровадити прогресивні технології та способи лазерного та гібридного лазерно-дугового зварювання в різні галузі промисловості і значно підвищити якість зварних з'єднань та продуктивність технологічного процесу.

1. Berdnikova O., Pozniakov V., Bernatskyi A., Alekseenko T., and Sydorets V. *Effect of the Structure on the Mechanical Properties and Cracking Resistance of Welded Joints of Low-Alloyed High-Strength Steels*. Procedia Structural Integrity, 16 (2019) 89-96.

2. Markashova L., Pozniakov V., Berdnikova O., et al. *Structure and Crack Resistance of N-A-XTRA-70 Steel Joints Manufactured by Hybrid Laser-Arc Welding*. Mat. Sci. Forum 927 (2018) 29-34.

Процес гідридоутворення у гетерофазних сплавах системи Ti-Zr-Mn-V зі структурою фази Лавеса та ОЦК-твердого розчину

Дехтяренко В.А., Прядко Т.В., Саввакін Д.Г., Бондарчук В.І., Могильний Г.С.

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

Тел.: +38 044 424 12 20 E-mail: Devova@i.ua

Раніше нами було показано [1, 2] перспективність використання у якості матеріалів для безпечного зберігання та транспортування водню у зв'язаному стані (гідрид), гетерофазних сплавів системи Ti-Zr-Mn-V зі структурою фази Лавеса та ОЦК-твердого розчину. Було показано, що за рахунок термічної обробки стає можливим гідрування сплавів даного класу при кімнатній температурі та тиску водню 0,6 МПа [2]. Але при цьому не було достеменно встановлено механізм взаємодії даних сплавів з воднем при кімнатній температурі.

З тим щоб встановити механізм гідридоутворення було виплавлено раніше досліджений заевтектичний сплав $Ti_{42,75}Zr_{27}Mn_{20,25}V_{10}$ [1], структура якого складається з первинних кристалів фази Лавеса та евтектичної складової. Для укрупнення фазових складових та можливості насичення сплаву воднем при кімнатній температурі його було піддано термічній обробці при температурі 900 °С впродовж 24 годин. Методом скануючої електронної мікроскопії було встановлено, що структура сплаву $Ti_{42,75}Zr_{27}Mn_{20,25}V_{10}$ після термічної обробки складається з кристалів ограненої форми фази Лавеса та кристалів ОЦК-твердого розчину. Методом рентгенівського фазового аналізу було підтверджено дані скануючої електронної мікроскопії про фазовий склад сплаву.

Процес взаємодії сплаву з воднем досліджувався при кімнатній температурі та тиску водню 0,6 МПа. Активне поглинання водню сплавом розпочалося вже через п'ять хвилин після контакту з водневмісним середовищем. Для збереження цілісності зразка процес поглинання був зупинений при досягненні концентрації поглинутого водню 0,82 мас.% (максимально можлива воднева ємність 2,6 мас.%).

Виходячи з раніше отриманих даних і даних скануючої електронної мікроскопії та рентгенівського фазового аналізу було встановлено, що процес поглинання водню розпочинається на кристалах фази Лавеса (дисоціація молекули водню на атоми відбувається на некомпенсованих міжатомних зв'язках) з подальшим проникненням атомарного водню в об'єм кристалу. За рахунок розчинення водню відбувається розтріскування кристалів фази Лавеса, що в подальшому полегшує дисоціацію молекули водню на атоми (за рахунок створеної поверхні чистої від окисного шару) та проникність його в об'єм. Також було встановлено, що атомарний водень який проникає в об'єм кристалу фази Лавеса, не залишається в ньому, а рухається через нього до ОЦК-твердого розчину. Це пов'язано з тим що ОЦК твердий розчин містить максимальну кількість елементів з високою спорідненістю по відношенню до водню (титан, цирконій). Це свідчить про те, що на початковому етапі взаємодії, фаза Лавеса слугує донором атомарного водню для ОЦК-твердого розчину.

1. V. A. Dekhtyarenko, T. V. Pryadko, D. G. Savvakín, and T. A. Kosorukova, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 11: 1455—1468 (2019) (in Russian) <https://doi.org/10.15407/mfint.41.11.1455>
2. V.G. Ivanchenko, V.A. Dekhtyarenko, T.V. Pryadko, et al. *Mater. Sci.* 51, 492—499 (2016). <https://doi.org/10.1007/s11003-016-9867-7>

The perspectives of shape memory alloys application in nuclear power engineering

Kosorukova T.A., Koval Yu.N., Odnosum V.V., Firstov G.S. (*)

G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, 36 Vernadsky blvd., 03142, Kiev, Ukraine. E-mail: yuri.firstov@gmail.com*

Amongst nuclear reactor materials one would find those that represent fuels, cladding, cool-ant, poison, moderator and structural materials. That is the list, which is considered as closed one for a long period of time. Functional materials did not get into this exclusive club despite some efforts that could be found in literature. In particular, shape memory alloys (SMA) were introduced as possible solution of certain technical problems that can be dealt with in the nuclear power engineering [1-2]. The desire to use them arises from the several attractive features of these functional materials. SMA are known to exhibit considerable strokes that might be triggered by the temperature, stress and even magnetic field. At the moment, NiTi and Cu-based shape memory alloys are the mostly used functional materials in contemporary industry [3]. Since the discovery of shape memory effect, a lot of effort was put into R&D of shape memory alloys with some successes ranging from home appliances to aerospace or automotive industries. The work output of shape memory alloys might reach even 20 J/cm³, recoverable strains vary from 3 to 8 % in polycrystalline state and single crystals might exhibit recoverable strains that could be close to 15%. Recovery stresses of 500 MPa might be generated in constrained conditions.

Still, at this very moment only nitinol (NiTi) is in an industrial use almost exclusively in medical sector, while other SMA applications came to a halt. Surely, NiTi possesses the best functional properties if one would not need to generate them higher than 390 K. Despite of this superiority over other SMA, NiTi exhibits shape memory degradation, thermal cycling and other effects that together are known as functional fatigue [4]. That is the reason, why industrial leaders in general are disenchanted with SMA. There is a need to win back their trust with the breakthrough in functional and mechanical properties stability. In this regard, the successful application of advanced shape memory alloys in such sector as nuclear power engineering seems to be quite a challenge but will become a convincing argument. Recently, while searching for the best solution for the problem of the design of high temperature shape memory alloys (HTSMA) it was found [5] that they possess diminished mechanical properties, prone to functional and structural fatigue [4]. Although it is possible to deal to some extent with each issue separately, the general improvement in all directions seemed to be impossible. At the same time, Yeh and co-authors [6] performed a breakthrough in structural materials design offering so-called high entropy alloys (HEA). These are multi-component alloys close to equiatomic composition that possess the entropy of mixing higher than 13 J/mol-K. Because of this contribution, Gibbs free energy decreases and, as a result, HEA have shown outstanding structural and diffusion stability. In addition, HEA demonstrate significant solution hardening phenomenon [7]. It appeared that all the positive HEA features were those that HTSMA needed badly for acceptable improvement. Paper [8] has shown the first positive result of the intentional search for martensitic transformation and associated shape memory effect in HEA. Together with the results published in [9], it all amounted to the creation of the novel advanced functional materials - high entropy shape memory alloys (HESMA) that have shown mechanical and functional properties superior to the existing industrial SMA.

Given example of MT and shape memory behaviour for HESMA [8, 9] indicates that these new materials represent the significant advance comparing with industrial SMA because they show remarkably stable functional characteristics. Comparison of selected properties for NiTi and HESMA given in Table 1 confirms general superiority of HESMA.

Table 1: Mechanical and functional properties comparison for NiTi and HESMA

Properties	NiTi	HESMA
MT temperature interval, K	77-390	77-1000
Elastic modulus, GPa	45	70-95
Yield strength, MPa	70-600	1200
Recoverable strain (SME), %	8→1	3
Work output, J/cm ³	10-20	30

It can be seen that due to the much higher yield strength HESMA retain 3% of the recoverable strain without any degradation implying extended lifetime (Table 1), while NiTi shows decrease in recovered strain from 8% at first cycle to 1% at 100000 cycles according to [10]. Obviously, the reason for HESMA superior behavior is two-fold strengthening because of significant lattice distortion implemented by the multi-component HESMA design. Such distorted lattice may oppose not only diffusion or plastic deformation but radiation damage also. In addition, HESMA show much higher than NiTi operation temperatures (up to 1000 K, Table 1). That is why, HESMA can be considered as perspective materials for actuators or sensors to be applied in nuclear power engineering and can be used, in particular, in safety relief valves or control rods etc.

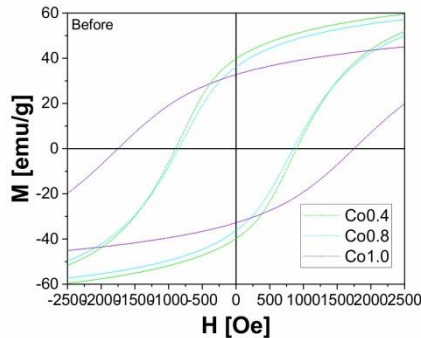
1. R.R. Ionaitis, At. Energy 82, 388–393 (1997). <https://doi.org/10.1007/BF02418737>
2. R.R. Ionaitis, Materials Science Forum, 327-328, 51-54 (2000). DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.327-328.51
3. K. Otsuka, C.M. Wayman, Shape memory materials, (Cambridge: University Press: 1998).
4. T. Niendorf P. Krooß, E. Batyrsina, A. Paulsen, Y. Motemani, A. Ludwig, P. Buenconsejo, J. Frenzel, G. Eggeler, H.J. Maier, Mater. Sci. Eng. A, 620, 359-366 (2015) <https://doi.org/10.1016/j.msea.2014.10.038>
5. G.S. Firstov, Yu. Koval, J. Van Humbeeck, A. Timoshevskii, T. Kosorukova, P. Verhovlyuk, Some physical principles of high temperature shape memory alloys design, in “Shape Memory Al-loys: Properties, Technologies, Opportunities”, N. Resnina and Vasili Rubanik Eds., P. 207-232, Trans Tech Publications, Zurich, 2015. doi:10.4028/www.scientific.net/MSFo.81-82.207
6. B.S. Murty, Jien-Wei Yeh, S. Ranganathan, High Entropy Alloys (Oxford: Elsevier Science & Technology Butterworth-Heinemann Ltd: 2014).
7. O.N. Senkov, G.B. Wilks, D.B. Miracle, C.P. Chuang, P.K. Liaw, Intermetallics, 18, 1758–1765 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2010.05.014>
8. G.S. Firstov, T.A. Kosorukova, Yu.N. Koval, V.V. Odnosum, Materials Today: Proceedings, 2S, S499-S504 (2015) DOI: 10.1016/j.matpr.2015.07.335
9. G.S. Firstov, T.A. Kosorukova, Yu.N. Koval, P. A. Verhovlyuk, Shape memory and Superelast-icity, 1, 400-407 (2015) <https://doi.org/10.1007/s40830-015-0039-7>
10. D. Stöckel, Proc. Actuator 92, Bremen, Germany, 79-84 (1992)

Вплив заміщення іонів кобальту в літій-залізні нанорозмірні ферити на їх магнітні характеристики

Кайкан Л.С.^{1(*)}, Мазуренко Ю.С.²

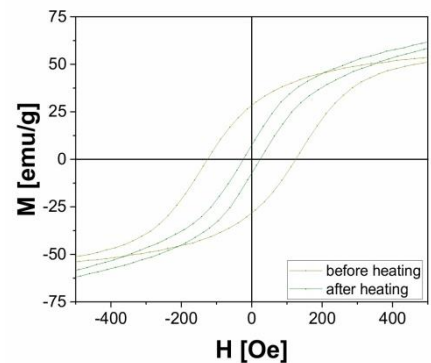
¹ ДВНЗ "Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника", вул. Шевченка, 57, 76018, Івано-Франківськ, Україна.

² Івано-Франківський національний медичний університет, вул. Галицька, 2, 76000, Івано-Франківськ, Україна E-mail: larysa.kaykan@gmail.com



Методом золь-гель автоспалювання отримано серію зразків літій-залізного фериту, заміщеного іонами кобальту загальної формули $Li_{0.5-x/2}Fe_{2.5-x/2}Co_xO_4$, де $x=0,0, 0,4, 0,8, 1,0$. Структура синтезованого кобальт-заміщеного фериту є чутливою до вмісту іонів Co^{2+} . Так, зразки з вмістом кобальту $0 \leq x \leq 0,4$ виявляють приналежність до просторової групи симетрії $R4_332$ при збільшенні вмісту допійованого елементу $x \geq 0,6$ спостерігається поява

шпінелі просторової групи $Fd3m$, вміст якої збільшується при зростанні концентрації впроваджених іонів від 5 до 12%. Причиною такої трансформації є порушення чергування іонів Li^+ і Fe^{3+} у співвідношенні 1:3 в октаедричних В-позиціях шпінельної ґратки. Проведені магнітні дослідження на приладі LakeShore VSM 4700 показали, що магнітні властивості отриманого матеріалу немонотонно змінюються при збільшенні заміщення.



На рис.1 наведено залежність намагніченості від прикладеного зовнішнього поля для зразків з вмістом кобальту 0,4, 0,8 і 1,0. На рис 2 наведено петлю гістерезису чистого, незаміщеного літій-залізного фериту до і після нагрівання до температури 1200°C.

Основні магнітні параметри синтезованих систем наведено в таблиці.

Вміст кобальту у x	Молярна маса μ (кг/моль)	Намагніченість насичення M_s (emu/g)	Залишкова намагніченість M_r (emu/g)	Коерцитивна сила H_c	Ефективний магнітний момент m_{eff} (μ_B)	Константа магнітної анізотропії $K \cdot 10^{-4}$	Ступінь квадратності $S = \frac{M_r}{M_s}$
0,0	207,1	70,8	30,2	112,0	2,63	0,8	0,43
0,4	218,1	72,2	39,8	888	2,82	6,7	0,55
0,8	228,6	68,7	36,3	839	2,81	6,0	0,53
1,0	234,63	57,7	32,8	1739	2,43	10,5	0,57
похибки	$\pm 0,1$	$\pm 0,1$	$\pm 0,1$	± 1	$\pm 0,01$	$\pm 0,1$	$\pm 0,01$

Синтезовані методом золь-гель автоспалювання нанорозмірні літій-залісні ферити, заміщені іонами кобальту показали покращення магнітних характеристик порівняно з незаміщеним зразком. Зміна характеристик є немонотонною відносно зміни вмісту звміщених іонів, що, очевидно пояснюється особливістю морфології та катіонного розподілу елементів системи. Дана модифікація дає можливість плановірно змінювати характеристики отриманого продукту згідно потреб їх застосування.

Супервеликі монокристали вольфраму у вигляді пластин та тіл обертання

**Никитенко Ю.О.¹, Шаповалов В.О.¹, Якуша В.В.¹,
Гніздило О.М.¹, Жолудь В.В.²**

¹ІЕЗ ім. Є.О. Патона НАН України, вул. К. Малевича 11, Київ, Україна

²ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України, бул. Ак. Вернадського 36, Київ, Україна

Тел.: +38 044 200 12-01, E-mail: nikyu80@gmail.com

Розвиток і вдосконалення енергогенеруючих пристроїв неможливо без розробки нових матеріалів. Це стосується як існуючих джерел енергії, так і тих, що розробляються, у яких в якості джерела енергії використовуються термоядерні реакції, а також джерела енергії на основі термоемісійних перетворювачів. В енергетиці великих потужностей найбільш перспективним вважається напрям, пов'язаний з керованим термоядерним синтезом, а для надійних джерел енергії міжпланетних кораблів і космічних станцій – термоемісійні перетворювачі.

Сьогодні в експериментальних установках керованого термоядерного синтезу залишається відкритим питанням облицювання внутрішньої поверхні камери. Усередині реактора повинна знаходитися високотемпературна плазма. В термоядерних реакторах з палаючої дейтерієво-тритієвою плазмою бомбардування нейтронами з високою енергією створить високу концентрацію радіаційних дефектів на поверхні облицювальних матеріалів. Тому до цих матеріалів пред'являються високі вимоги як по термостійкості так і по радіаційній стійкості.

Вольфрам має низьку розчинність, практично всіх ізотопів водню, що особливо важливо, тому що робоче середовище реактора містить дейтерії та тритій. Розчинність водню в вольфрамі істотно менше, ніж в сталях. Водень практично не розчиняється в вольфрамі, а захоплюється лише дефектами структури. Накопичення дейтерію в полікристалічному вольфрамі в 4-5 разів нижче, ніж в напильному вольфрамі, тому дуже важлива однорідність та бездислокаційність структури. Тому крім чистоти металу особливі вимоги пред'являються до структури металевого вольфраму і в цьому напрямку ідеальної структурою є – монокристал із заданою орієнтацією.

В ІЕЗ ім. Є.О. Патона НАН України була створена унікальна технологія вирощування монокристалів тугоплавких металів у вигляді пластин 170-160-20 мм (рис. 1а) і відпрацьована технологія та проведені матеріалознавчі дослідження, що підтвердили їхні монокристалічні властивості, та дали підґрунтя для подальших розробок у цьому напрямку. В останні роки було створено новітню не маючу світових аналогів технологію вирощування супервеликих монокристалів вольфраму у вигляді тіл обертання (циліндр) діаметром 85 мм (рис. 1б). При проектуванні закладено можливість вирощування монокристалів у вигляді тіл обертання (циліндр або пустотілий циліндр) зовнішнім діаметром до 100 мм (4 дюйми). У якості застосування монокристали вольфраму можуть знайти безальтернативне впровадження, як у вигляді широкоформатного прокату, так і у вигляді виробів зі злитків.

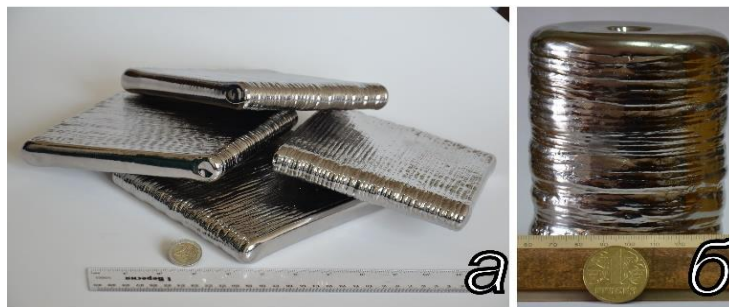


Рис. 1 Зовнішній вигляд: а – плоских монокристалів вольфраму 170x160x20 мм, б – кристалу вольфраму у вигляді циліндру діаметром 85 мм

Вплив ультразвукової обробки на мікромеханічні властивості аморфних сплавів

Цареградська Т.Л.¹, Плющай І.В.¹, Козаченко В.В.¹, Курилюк А.М.¹,
Розуван С.Г.¹, Плющай О.І.²

¹¹Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
вул. Володимирська, 64/13 01601, Київ, Україна

² Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, 03680, МСП,
Київ-142, Україна *

*Тел.: +38 0688074960 E-mail: plyushchay@gmail.com

Експериментально досліджено вплив ультразвукової обробки на мікромеханічні властивості аморфного сплаву $\text{Fe}_{76}\text{Ni}_4\text{Si}_6\text{B}_{14}$. Встановлено, що мікромеханічні властивості аморфного сплаву, індикатором яких виступає величина мікротвердості, під впливом ультразвукової обробки зазнають суттєвих змін, а саме, спостерігається ефект пластифікації: мікротвердість аморфного сплаву після проведеної ультразвукової обробки зменшується на (10-28)%. (рис.1). Зменшення мікротвердості можна пояснити тим, що проведена ультразвукова обробка призводить до зменшення розмірів або розчинення в заморожених центрів кристалізації, внаслідок чого відбувається гомогенізація структури аморфного сплаву. Цей факт підтверджується дослідженнями топології поверхні аморфного сплаву $\text{Fe}_{76}\text{Ni}_4\text{Si}_6\text{B}_{14}$, проведеними за допомогою атомного силового мікроскопу (рис.2).

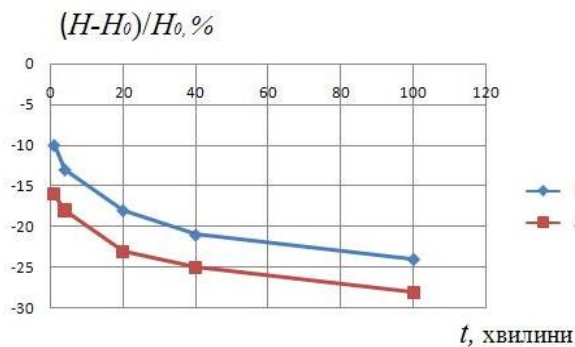


Рис. 1. Залежності відносної зміни мікротвердості від часу ультразвукової обробки: 1 - інтенсивність УЗО: 1 Вт/см²; 2 – інтенсивність УЗО: 2 Вт/см²

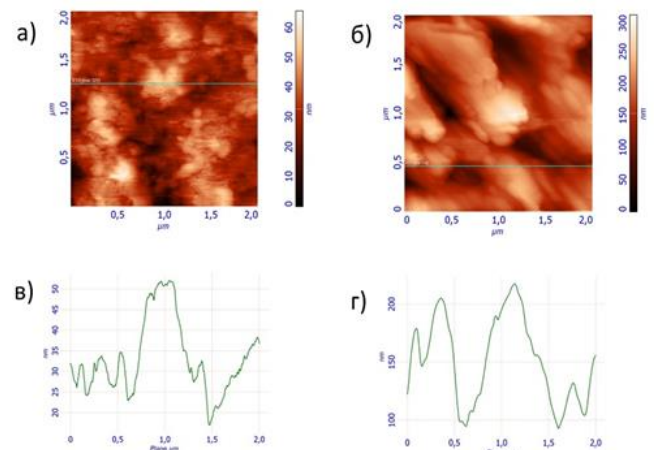


Рис.2. Топологія поверхні аморфного сплаву: а) вихідний зразок; б) зразок після обробки ультразвуком; в) та г) відповідні зрізи топограм а) та б).

Поверхня аморфного сплаву після ультразвукової обробки кардинально змінюється: менші зерна зникають, а більші утворення стають рельєфнішими. Це може свідчити про те, що менші зерна, які є замороженими центрами кристалізації, під дією ультразвукової обробки розчиняються в аморфній фазі. Пластифікуючий вплив ультразвукової обробки на аморфний сплав можна пояснити сукупністю дій таких механізмів: розчиненням заморожених центрів кристалізації, а також акумуляцією і анігіляцією вільного об'єму, перерозподілом і релаксацією внутрішніх напружень, перерозподілом хімічних елементів.

Комплексний підхід до захисту титанових конструкцій від водневого окрихчення

Прядко Т.В., Дехтяренко В.А.

*Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ-142, бульвар
Вернадського, 36, Україна. *Тел.: +38 044 424 1220 E-mail: pryadko@imp.kiev.ua*

Основна умова, при якій має місце крихке руйнування твердого тіла під впливом водню, це його поглинання до концентрацій, що обумовлює суттєві зміни об'єму і, як наслідок - виникнення внутрішніх напружень локально переважаючих напруги, необхідні для руйнування матеріалу. У тих випадках, коли титан чи сплави на його основі в процесі експлуатації опиняються в середовищі, що містить водень, необхідно вживати заходи, що перешкоджають проникненню водню в об'єм матеріалу. Проникнення водню в метали лімітується явищами, що відбуваються на поверхні, і інтенсивність цього процесу визначається каталітичною активністю поверхні та її «прозорістю» для дифузії водню в об'єм матеріалу. У такому разі можливими способами боротьби з водневою крихкістю можуть бути захисні покриття, що перешкоджають наводненню. Ще одним способом боротьби з водневою крихкістю титану є легування, що зменшує швидкість взаємодії металу з воденьмістким середовищем та підвищує максимально допустимі концентрації водню. Для титану захисними легуючими елементами є Al, Fe, Mo, Ni. Зокрема, алюміній збільшує розчинність водню в α -фазі і ускладнює утворення гідридної фази. Тому збільшення вмісту алюмінію в α -Ti - ефективний спосіб зменшення його схильності до водневої крихкості. Наші дослідження направлені на вивчення комплексного впливу легування та захисного покриття на стійкість титану до окрихчення у водневому середовищі.

Для вирішення поставлених задач виготовлено зразки кубічної форми з розміром ребра 10 мм з переплавленого йодидного титану та сплаву Ti+6,69%Al+0,81%Mo. При визначенні легуючих елементів було враховано що: вони часто входять до складу титанових сплавів; за умов проведення досліджень майже не взаємодіють з воднем; підвищують максимально допустимі концентрації водню. В якості бар'єрного шару було обрано покриття AlN (на основі відомостей, що нітрид алюмінію стійкий в атмосфері водню та вуглекислого газу до 980°C), нанесені в гібридному гелікон-дуговому йоно - плазмовому реакторі на усі грані куба, що дало змогу повністю захистити об'єм зразка від безпосереднього контакту з водневим середовищем.. Для забезпечення доцільного часу протікання експерименту температуро – баричні умови процесів наводнення обирались значно жорсткішими за умови, при яких, зазвичай, експлуатуються титан та сплави на його основі.

Для зразків із захисним покриттям характерне для поглинання відхилення зміни тиску від температури у замкненому об'ємі зафіксовано при температурі 700°C (для незахищеного титану T= 450°C). Це свідчить про те, що найвища каталітична здатність притаманна поверхні вихідного зразку, а для покриттів вона значно нижча.

В значній мірі знижується і проникність водню через такі бар'єрні шари. Кількість поглинутого водню зразками з нанесеним захисним шаром впродовж 6 годин при температурі 450°C та 2 годин – при 700°C на порядок менша ніж відповідний показник для незахищеного зразку, процес гідрування якого відбувався у значно м'якших умовах. Також слід зауважити, що кількість поглинутого водню титаном із AlN – покриттям перевищує на 30% такий же показник для сплаву Ti+6,69%Al+0,81%Mo, що вказує на позитивний вплив запропонованого легування.

Отже, запропонований нами комплексний підхід до захисту титанових конструкцій від водневого окрихчення довів свою дієвість: сформовані захисні шари призводять до пониження каталітичної здатності поверхні, а додаткове легування перешкоджає проникненню водню в об'єм матеріалу, про що свідчить суттєве зниження кількості поглинутого водню.

Модифікований епоксиретан як захисне покриття кремнієвих сонячних елементів

Ященко Л.М.¹, Стебленко Л.П.², Воронцова Л.О.¹, Курилюк А.М.²

¹Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, 48, Харківське шосе, Київ, 02161, Україна

²Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний ф-т, 64/13, вул. Володимирська, Київ, 01601, Україна

Тел.: +38 067 967 2417 E-mail: la.voronzova@gmail.com

Для забезпечення високої ефективності чутливі фотоелектричні компоненти сонячних елементів (СЕ) потребують захисту від дії агресивних факторів навколишнього середовища, зокрема магнітного поля та радіації. Через малу вагу, низьку ціну та спеціальні характеристики полімерні матеріали можна розглядати як хорошу альтернативу боросилікатному склу з інкапсулянтном, що дозволить зменшити кількість захисних шарів фронтальної частини СЕ та оптимізувати виробничі затрати. Метою роботи було вивчення впливу модифікації епоксиретану (ЕУ) як захисного покриття кремнієвих фотоелектричних перетворювачів (ФЕП) на запобігання процесам їхньої деградації.

Вихідний ЕУ полімер, отриманий взаємодією епоксиретанового олігомеру (ЕУО) на основі 2,4-2,6 толуїлендіізоціанату і поліоксипропіленгліколю ММ 1052 з подальшим додаванням епоксидної смоли DER-330, був отверднений ізометилтетрагідрофталеєвим ангідридом при 125 °С. Модифіковану композицію (А-ЕУ) готували шляхом перемішування ЕУО та модифікатора (триєтиленглікольдиметакрилат ТГМ-3) в кількості 10,0 мас.% з подальшим введенням в стехіометричному співвідношенні твердника (ізо-метилтетрагідрофталеєвий ангідрид) та прискорювача тверднення (УП-606/2). Зразки ФЕП космічного (ФЕП-к) та наземного (ФЕП-з) призначення з нанесеними на фронтальну поверхню ЕУ та А-ЕУ покриттями піддавали дії постійного магнітного поля (МП) індукцією $B = 0,17$ Тл протягом 7 діб та $B = 0,9$ Тл протягом 1 год. Захисну функцію покриття визначали дослідженням швидкості рекомбінації нерівноважних носіїв заряду (ННЗ) за допомогою методу релаксації фото-ЕРС. За кінетичними залежностями спаду фото-ЕРС розраховували параметри τ_1 та τ_2 , що відповідають часу життя ННЗ на поверхні та в приповерхневій області зразків ФЕП.

Встановлено, що за наявності вихідного ЕУ покриття значення часу життя ННЗ для зразків ФЕП-к вищі в порівнянні зі зразками ФЕП-з – на поверхні в ~ 2 рази, а в приповерхневій області в ~ 5 разів. Порівняно з ЕУ покриттям нанесення на поверхню модифікованого (А-ЕУ) покриття приводило: для ФЕП-к – до зростання τ_1 та τ_2 в $\sim 2,5$ рази; для ФЕП-з – до зростання τ_1 в $\sim 5,4$ рази та τ_2 в $\sim 13,3$ рази. Виявлені відмінності можуть бути проявом взаємодії полімерних композицій з підкладкою.

Дослідження впливу МП на зразки ФЕП-к і ФЕП-з з ЕУ та А-ЕУ покриттями показало, що параметри τ_1 та τ_2 практично не змінювались під дією МП як з низьким значенням індукції ($B = 0,17$ Тл), так і з більшим ($B = 0,9$ Тл).

Таким чином, без дії МП на зразки ФЕП-к та ФЕП-з наявність А-ЕУ покриття демонструє значне зростання параметрів τ_1 та τ_2 порівняно з ЕУ покриттям, що вказує на можливість використання покриття на основі модифікованого епоксиретану для підвищення часу життя нерівноважних носіїв заряду кремнієвих ФЕП. Оскільки МП не впливає на значення τ_1 та τ_2 у всіх досліджуваних зразках, це свідчить про захисну функцію полімерних композицій, що запобігає перебігу процесам деградації електрофізичних параметрів. Отже, одержані результати відкривають перспективу використання захисних покриттів на основі модифікованих епоксиретанових композицій для підвищення ефективності кремнієвих СЕ та зниження їхньої собівартості.

**Поліуретани з інкорпорованими в них родаміновими барвниками як
твердотільні лазерні елементи**

**Антоненко О.І.¹, Косянчук Л.Ф.^{2(*)}, Бровко О.О.¹, Безродна Т.В.²,
Безродний В.І.², Негрійко А.М.²**

¹*Інститут хімії високомолекулярних сполук НАНУ, 48, Харківське шосе, Київ, 02160,
Україна*

²*Інститут фізики НАНУ, 46, проспект Науки, Київ, 03680, Україна
Тел.: +38 044 29 10303 E-mail: lkosyanchuk@ukr.net*

Одним з перспективних напрямів розвитку лазерів на барвниках є використання полімерів як матриць в твердотільних лазерних елементах. Поліуретанові матриці відрізняються від інших полімерів своїм широким спектром властивостей, якими можна керувати, варіюючи хімічний склад вихідних компонентів та застосовуючи різні методи затвердіння, зокрема фото-, термopolімеризацію чи поліконденсацію. Завдяки високій сегментальній рухливості ланок поліуретанових ланцюгів можна одержати променеву міцність лазерних елементів, яка необхідна для роботи потужних лазерів, що працюють в моноімпульсному та в імпульсно-періодичному режимах.

Родамінові барвники характеризуються, з однієї сторони, високим квантовим виходом флюоресценції, що забезпечує поряд з наносекундною тривалістю її затухання, створення ефективних активних елементів для лазерів на барвниках. А з іншої сторони, молекули родамінів в силу своєї молекулярної будови (наявність аміногруп на кінцях ксантенового містка) схильні до формування асоціатів. Асоціація молекул родамінових барвників виявлена в різних середовищах, причому її характер (ступінь і порядок асоціації, будова агрегатів) суттєво залежить від природи розчинника як рідкого так і полімерного. В поліуретанах родаміни асоціюють здебільшого в димери Н-типу внаслідок утворення водневих зв'язків між присутніми в молекулах барвників аміно- та карбоксильною групами. Виникнення таких асоціатів значною мірою впливає на фотофізичні та фотооптичні властивості барвників.

Використання нанокомпозитів, що утворюються шляхом механічного змішування або хімічної взаємодії органічної складової полімеру та неорганічних наночастинок діоксиду кремнію (аеросилу А-300), може значно впливати на спектральні властивості родамінових барвників в поліуретанах, отриманих реакцією фотополімеризації та поліконденсації.

На підставі аналізу спектрів поглинання та люмінесценції родаміна 6Ж в поліуретанах в залежності від їх хімічного складу та кількості наночастинок аеросилу А-300, введеного в реакційну поліуретанову суміш, показано, що комбінація діізоціанатної та олігоетерної складової поліуретанів, яка визначає його полярність (діелектричні проникність, яка в нашому випадку лежить в межах 4,1 – 11,2), значною мірою впливає на спектральні характеристики барвника.

Визначено, що зростання полярності полімерної матриці за рахунок комбінації її вихідних складових приводить до зменшення кількості асоціатів. Збільшення вмісту аеросилу в нанокомпозиті на основі низькополярних полімерів позитивно впливає на дисоціацію димерів.

Першопринципне моделювання особливостей електронної структури композиту TiC-TiB_2

Плющай І.В.¹, Горкавенко Т.В.¹, Цареградська Т.Л.¹,
Каленик О.О.¹, Плющай О.І.^{2(*)}

¹Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
вул. Володимирська, 64/13 01601, Київ, Україна

² Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, 03680, МСП,
Київ-142, Україна *

*Тел.: +38 0688074960 E-mail: plyushchay@gmail.com

Композитні матеріали на основі TiC-TiB_2 , порівняно з однофазною керамікою, виявляють надзвичайно корисний комплекс властивостей, включаючи високу твердість, хорошу зносостійкість та високу в'язкість при руйнуванні, та представляють собою перспективні функціональні матеріали для інновації традиційних енергокомплексів. Нами було проведено першопринципне моделювання атомної структури, електронних спектрів та модуля всебічного стиснення композиту TiC-TiB_2 . Розрахунок проводився методом функціоналу густини в узагальненому градієнтному наближенні за допомогою пакету програм ABINIT.

Структуру як TiC так і TiB_2 можна представити як чергування шарів атомів титану, що мають структуру щільноупакованих сфер, з: в першому випадку - шарами атомів вуглецю, а в другому – графітоподібними шарами атомів бору. Для моделювання композиту TiC-TiB_2 ми побудували надкомірку, представлену на рис.1 (в дужках позначено тип пакування сфер – А, В чи С). Був проведений числовий відпал надкомірки, при якому відбувалася релаксація положень атомів у відповідності з силами, розрахованими з перших принципів.

На рис. 2 представлені електронні спектри: а- надкомірки TiC-TiB_2 ; б, с та d – локальні спектри атомів титану з різним оточенням відповідного шару. Основною особливістю електронних спектрів композиту TiC-TiB_2 є псевдощілина в околі рівня Фермі, яка формується переважно 3d-електронними станами атомів Ti. Така картина електронних спектрів в околі рівня Фермі подібна до спектрів TiB_2 . Ми вважаємо, що цей мінімум є структурно індукованим саме площиною атомів зі структурою щільноупакованих сфер. Як показують наші розрахунки, локальні спектри атомів титану поблизу рівня Фермі дуже подібні в незалежності від оточення (рис.2). Проведений нами аналіз електронних спектрів виявив високу когерентність фаз в композиті TiC-TiB_2 .

Лінійна апроксимація залежності тиску від об'єму надкомірки, обрахована з перших принципів, дозволила визначити модуль всебічного стиснення: $K=(252\pm 2)\text{GPa}$, що практично не відрізняється від такого для TiB_2 .

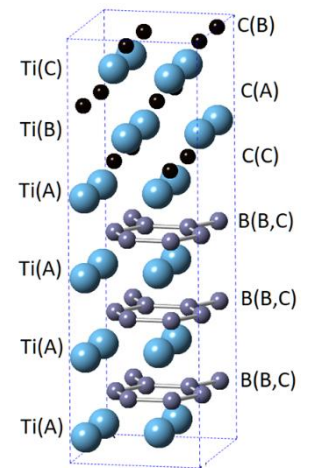


Рис. 1 Надкомірка.

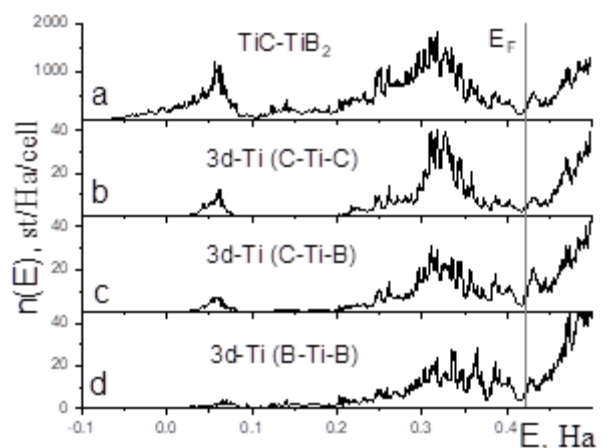


Рис. 2 Електронні спектри TiC-TiB_2 .

Оптимізація впливу зовнішнього електромагнітного поля на якість металу шва при зварюванні під водою

С.Ю.Максимов, О.О.Прилипко*, О.М Бердникова, Ю.А. Шепелюк

Інститут електрозварювання ім. Є.О.Патона НАН України

**Тел.: +38 0442052115 E-mail: ead56@ukr.net*

Підвищення якості зварних з'єднань, розробка та вдосконалення електродугових процесів і пристроїв вимагають комплексного експериментального і теоретичного дослідження. Одним з найбільш перспективних методів, що забезпечує необхідну міцність і пластичність металу з'єднання є метод зварювання в зовнішньому електромагнітному полі. Відомо про позитивний вплив магнітного поля на властивості і структуру металу при зварюванні багатьох сталей [1].

Перемішування зварювальної ванни має суттєвий вплив на процес кристалізації розплавленого металу, газообмінні реакції і формування структури металу шва. Проведені дослідження підтвердили ефективність використання зовнішнього електромагнітного впливу в умовах зварювання під водою для підвищення механічних властивостей металу шва [2].

Для подальшого вдосконалення технології механізованого підводного зварювання було використано методи математичного моделювання, як найбільш раціональні для оптимізації експериментальних досліджень в умовах водного середовища.

Математичні моделі дозволили врахувати вплив як первинних чинників, а саме заданий струм і напруга в зварювальному ланцюгу і індукторі, властивості матеріалів і умови протікання процесу, так і вторинних - формування структури металу шва і зони термічного впливу на властивості зварного з'єднання. Розроблений алгоритм дозволяє спростити процес розрахунків для оптимізації технологічного процесу і підвищення якості зварного виробу [3-4].

За допомогою розробленої програми на мові Delphi 7 проведені чисельні експерименти із дослідження поведінки рідкого металу в зварювальній ванні залежно від параметрів зовнішнього електромагнітного впливу і режимів зварювання. Аналітичною оцінкою диференційованого вкладу структурних складових у зміну механічних властивостей металу зварних з'єднань показано, що основний внесок в зміцнення і підвищення тріщиностійкості вносять складові нижнього бейніту.

Виконаю аналіз впливу структурних факторів на дислокаційну структуру і зміну локальних внутрішніх напружень - зон локалізації деформації в структурах верхнього та нижнього бейніту для досліджуваних варіантів зварних з'єднань. Встановлено параметри зовнішнього електромагнітного поля, що забезпечують отримання якісних зварних з'єднань при зварюванні низьколегованих сталей під водою та їх тріщиностійкість.

1. В.П. Черниш, *Устаткування для зварювання з електромагнітним перемішуванням*. Вища школа: 1984. 56 с.
2. С.Ю. Максимов, Р.М. Рижов, Е.А. Прилипко, В.І. Кожухар, *Автоматическая сварка*, №11(2004).
3. Г.А. Грінберг, *Вибрані питання математичної теорії електричних і магнітних явищ*. - М.: Изд. АН СРСР, 1948. - С.727.
4. О.В Тозоні, *Математичні моделі для розрахунку електричних і магнітних полів*. - К.: Наукова думка. 1964. - 271 с.

**Синтез, структурно-морфологічні та електрохімічні властивості
ультрадисперсних оксидів молібдену**

Юсько Д.¹, Качмар А.¹, Годлевська М.¹, Коцюбинський В.О.¹, Бойчук В.М.¹

¹ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника», 76018, вул.

Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, Україна

Тел.: +38 0973803959 E-mail: kotsuybynsky@imp.kiev.ua

Гідротермальним золь-гель методом здійснено синтез ультрадисперсних оксидних систем на основі моноклінних оксидів молібдену а також композиту моноклінного оксиду молібдену / мікропористий вуглець.

Кристалічна мікроструктура та морфологічні характеристики отриманих матеріалів досліджено методами рентгеноструктурного аналізу та низькотемпературної адсорбції азоту.

Встановлено, що матеріал отриманий при гідротермальному синтезі до відпалу представляє собою суміш моноклінних фаз три- та двооксиду молібдену. Відпал в інертній атмосфері при температурі 400°C веде до переходу метастабільного триоксиду в стабільний двооксид та монофазного стану зразка. За умови використання в якості компоненти реакційного середовища мікропористого вуглецю фазовий склад матеріалу не змінюється проте спостерігається зростання міжплощинних відстаней в двооксиді молібдену, зумовлене, ймовірно, входженням в кристалічну ґратку вуглецевих фрагментів на етапі гідротермального синтезу. Енергія активації провідності суміш моноклінних фаз три- та двооксиду молібдену становить $(0,075 \pm 0,018)$ еВ. Для вуглецевого матеріалу близько 75 % об'єму пор припадає на порожнини з середніми розмірами < 2 нм при величині питомої площі близько 1100 м²/г. Розрахунок за методом DFT розподілу пор за розмірами для оксидного матеріалу виявив, що він характеризується дво модальним розподілом з максимумами при 1,35 нм та близько 3 нм. Загальна питома площа поверхні для оксидного матеріалу становить близько 168 м²/г і розподілена між мікро- та мезопорами приблизно в рівних співвідношеннях. Для композиту, при синтезі якого застосовувалася вуглецева компонента площі поверхні становить близько 180 м²/г, за умови домінування мікропор.

При застосуванні гідротермально синтезованої суміші моноклінних фаз три- та двооксиду молібдену в якості основи електродної композиції для гібридного суперконденсатора досягнуто значення питомої ємності до 26 Ф/г при швидкості сканування потенціалу 1 мВ/с при застосуванні в якості електроліту 1 М водного розчину КОН. Для композиту на основі суміші моноклінних МоО₃ та МоО₂ та мікропористого вуглецю питома ємність за аналогічних умов становить близько 54 Ф/г, що можна пояснити кращими умовами електронного та іонного транспорту.

Template synthesis, structure, morphology and electrochemical properties of mesoporous titania

**I.F. Myronyuk¹, V. O. Kotsyubynsky¹, V.I. Chelyadyn²,
V.M. Boychuk¹, M. Hodlevskyi¹**

¹*Vasyl Stefanyk Precarpathian National University,
57 Shevchenko str, Ivano-Frankivsk 76018, Ukraine.*

²*Institute of Metal Physics, National Academy of Science,
36 Acad. Vernadsky Boulevard, Kyiv, 03680, Ukraine.*

Tel.: +38 0973803959 E-mail: kotsyubynsky@imp.kiev.ua

Nanostructured titania is one of the most wide used oxide nanomaterial due to its various applications. Functional characteristics of the titania depend on its phase composition, structural and electronic properties. Synthesis of non-homogeneous porous materials with increased reactivity and conductivity is an actual. The properties of TiO₂ and its possibility of successful technological application depend on the synthesis method. The sol-gel synthesis of titania involves the chemical conversion of titanium alkoxides or titanium tetrachloride into a colloidal product. The nucleation of specific titanium dioxide polymorph is caused mostly by the spatial arrangement of the primary monomers [Ti(OH)_h(OH₂)_{6-h}]^{(4-h)⁺} formed at the hydrolysis and is determined by the pH of reaction medium. Titanium butoxide Ti(OC₄H₉)₄ was used as a precursor for titania obtaining, sulfate acid was used as a hydrolysis agent and cetyltrimethylammonium chloride (CTMA-Cl) was a template. Absolute ethanol was used for surfactant extraction. Five titania samples were obtained at the different pH –1.0, 1.2, 1.4, 1.6 and 1.8, marked M1-M5 respectively and investigated by XRD, TEM and low temperature nitrogen adsorption. The reaction $Ti(OC_4H_9)_4 + nH_2O \rightarrow Ti(OH)_n(OC_4H_9)_{4-n} + nC_4H_9OH$ occurs at the first stage of titanium butoxide hydrolysis. The subsequent reaction is the formation of [Ti(OH)₂(OH₂)₄]²⁺ monomers. The possibility of rutile and anatase phases nucleation is close at these conditions. The presence of SO₄²⁻ leads to chelating bidentate complex formation and the anatase phase nucleation is initiated. CTMA⁺ ions form a hexagonal array of cylindrical micellae with hydrophobic alkyl inside and charges hydrophilic groups on the outer side. The titania nucleation in this array of tubular channels with the further template extraction leads to mesoporous materials obtaining. All materials obtained by initial xerogels drying at 80°C were close to amorphous (XRD data) with anatase structural motives and crystallize to nanostructured anatase after annealing at 500°C. It was determined (low angle X-ray scattering data) that the titania samples have mesoporous structure. The Bragg spacing value for (100) reflection of ordered structure is 2.5 nm and hexagonal lattice constant is 2.9 nm. Specific surface areas (low temperature nitrogen adsorption data, BET model) non-linear vary depending on the pH in a range 88-348 m²/g with the maximum for M3 sample obtained at pH=1.4. Specific volume of mesopores (equivalent model of cylindrical pores) changes in the range 0.56 - 1.68 cm³/g. The obtained materials were used as a base of the cathode for the lithium power sources. Cathode composition consist of titania (90 mass %) acetylene black (8 mass %) and PVF (2 mass %). Polarizing and comparison electrodes were made from lithium foil, 1M LiBF₄ in γ-butyrolactone was used as the electrolyte. The discharges were carried out in galvanostatic conditions at current density of C/10. Character of the discharge curve is the result of the different processes domination at different stages of discharge: intercalation, formation of double electric surface layer, change of material phase composition. The obtained values of specific power density vary in a range 870-1750 W/kg. Specific capacity and power density increase with the pore volume and specific surface area enlarging. The kinetic of the discharge process was investigated by impedance spectroscopy. The presence of the only one kinetic process during discharge was determined. Diffusion coefficients, calculated accordingly to, decline exponentially with the increasing of intercalation degree in a range of 1·10⁻⁸-2·10⁻¹¹ cm²/s.

**Особливості електропровідності наносистеми
вуглецеві нанотрубки-метал**

Г.Ю. Михайлова

Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,

бульвар Академіка Вернадського, 36 Україна, 03142, Київ

E-mail: mihajlova.halina@gmail.com

Властивості масиву вуглецевих нанотрубок або матеріалу, що містить ВНТ, відрізняються від властивостей індивідуальних нанотрубок (одношарових або багатшарових). Масив ВНТ, на відміну від індивідуальних нанотрубок, може не проводити електричний струм. Це пов'язано з тим, що зв'язки між сусідніми нанотрубками є ван-дер-ваальсовими.

Особливості металоматричних композитів, зміцнених ВНТ, обумовлені наступними факторами: відмінності у властивостях ВНТ; важкість розчеплення агломератів і рівномірного розподілу ВНТ у металі; проблема компактування суміші порошку металу та ВНТ; широка варіація відношення довжини до діаметру ВНТ; можливість хімічних реакцій між вуглецем та металом, що приводять до утворення карбідів.

Системи, що містять частинки міді, та модифіковані нанотрубками мають гарні характеристики для використання в приладобудівній та енергетичній галузях.

Досліджено електропровідні властивості системи Cu-ВНТ у процесах навантаження-розвантаження, яке сприяє встановленню контактів між сусідніми частинками та збільшенню їх площі, що змінює орієнтацію та геометрію ВНТ а, відповідно, і властивості.

Встановлено, що збільшення концентрації ВНТ до 17 мас. % та 30 мас. % сприяє зростанню електропровідності в 2 рази, порівняно з вихідними компонентами, що пов'язано з переносом електронів з металічних частинок до ВНТ. При наступному збільшенні концентрації спостерігається її падіння.

Magnetic metal-carbon nanocomposite

V.B. Boledzyuk, Z.D. Kovalyuk, S.P. Yurcenyuk

Frantsevich Institute of Materials Science Problems (Chernivtsi Branch), National Academy of Sciences of Ukraine, I. Vilde Str., 5, Chernivtsi, 58001 Ukraine

e_mail: chimsp@ukrpost.ua

Activated nanoporous carbon materials are used as electrodes for supercapacitor (SC), lithium-ion batteries, hydrogen and lithium containers [1], and are being actively researched to create metal-carbon nanocomposite materials with new functionality and are already being used to improve performance. Of particular interest are carbon nanocomposites with ferromagnetic metals - Ni, Fe, Co, which are promising for improving the specific characteristics of lithium-ion batteries and SC. They can be effectively used as absorption and scattering systems for high frequency electromagnetic radiation (20 - 40 GHz) [2] and materials with high catalytic capacity [3].

There are a number of technological methods for producing metal-carbon nanocomposites. Most of them are based on complex multi-stage processes, and the result is a highly dispersed powder in which the metal nanoparticles are covered with carbon. The manufacture of electrodes for SC from such powders requires the use of different types of binder materials, which reduces the effective pore surface. Monolithic nanocomposites in which the surface of the pores is covered with a thin film (solid or not solid) of metal are more promising for SC electrodes.

In this paper, we attempted to obtain a Ni-C nanocomposite based on pyrolysis carbon obtained from organic plant origin. To do this, birch wood as blocs 1.5×0.5×0.5 cm was dried and impregnated with 1M aqueous solution $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ for 140 h. Then the samples were dried in a drying chamber at $T=105-115\text{ }^\circ\text{C}$ for 3 h and placed in a closed steel reactor (with free release of pyrolysis gases) in a muffle furnace. The heating rate of the furnace was $5-7\text{ }^\circ\text{C}/\text{min}$. Working temperature of pyrolysis $950\text{ }^\circ\text{C}$. Isothermal holding time of 15 min. As a result, get monolithic samples of pyrolysis carbon with clusters of metallic Ni and its oxide are in its pores. A simple confirmation of this is that the obtained monolithic metal-carbon nanocomposite reacts to the magnetic field and is well attracted by the magnet. The powdered (dispersion $\leq 75\text{ }\mu\text{m}$) nanocomposite is grab without a residue by a magnetic field, which indicates a sufficiently homogeneous distribution of Ni clusters in the structure of the carbon frame.

On the basis of the obtained Ni-C nanocomposite, models of symmetric SCs with aqueous 6M KOH-electrolyte were fabricated. Their specific capacity was 50-60 F/g. The obtained values of the capacitance are typical for carbon-based SCs with aqueous electrolytes. This indicates the need for further studies of Ni-C nanocomposites for different energy storage systems.

1. Robert A. Huggins Energy Storage Fundamentals, Materials and Applications // Springer International Publishing Switzerland 2010, 2016. 540 p.
2. Qi Li, Zheng Zhang, Luping Qi, Qingliang Liao, Zhuo Kang, Yue Zhang Toward the Application of High Frequency Electromagnetic Wave Absorption by Carbon Nanostructures // Adv. Sci. 2019, 6, 1801057
3. Chuangang Hu, Jia Qu, Ying Xiao, Shenlong Zhao, Hao Chen, and Liming Dai Carbon Nanomaterials for Energy and Biorelated Catalysis: Recent Advances and Looking Forward // ACS Cent Sci. 2019 Mar 27; 5(3): 389–408.

Investigation of magnetic properties of Co-Mn-Zn ferrites obtained by contact low-temperature non-equilibrium plasma

Erolova L.^(*), Pivovarov O, Hrydnieva T.

Ukrainian State University of Chemical Technology, Ukraine

**Corresponding author Tel.: +38 032 46-63-51 E-mail: 19kozak83@gmail.com*

Ferrites of transition metals are widely used to produce permanent magnets, magnetic fluids, microwave devices, and store high-density information. The properties of nanoscale magnetic materials strongly depend on the shape, size and phase composition of the particles. The great interest of researchers in nanoscale materials in recent years is associated with the possibility of changing the properties of magnetic materials by controlling the size of particles and the distribution of cations over the sublattices in ferrite.

Ferrite nanoparticles of several metals showed improved magnetic characteristics compared to individual components due to the synergistic effect of the mutual presence of cations. A variety of ferrite production technologies are currently used. However, obtaining a single-phase product requires calcination of the precursors at a temperature of 1000-1300 °C. It causes agglomeration and sintering of the product. The use of hydrophase chemical synthesis methods is the basis for the production of ferrites of transition materials with a given set of properties. A characteristic recent trend is the development of new technologies for the production of nanodispersed ferrites.

The aim of this work is to study the possibility of using contact low-temperature nonequilibrium plasma for the synthesis of complex ferrites, to establish the relationship between the cationic composition of ferrites and its phase composition, magnetic and structural characteristics.

Ferrites Mn-Zn, Co-Zn, Co-Mn were synthesized in the form of nanoparticles using contact nonequilibrium low-temperature plasma. The crystalline microstructure of the samples was elucidated using x-ray diffraction and x-ray phase methods. Magnetic characteristics were determined by hysteresis loops. EPR spectra were obtained using a Radiopan SE / X-2543 radio spectrometer. To characterize the EPR signals, the signal intensity and signal width, resonance frequency were used. The dependences of the technological characteristics of Co-Mn-Zn ferrites on the cationic composition were visualized by the simplex method using the STATISTICA 12.

It was established that the nature of a divalent cation directly determines the magnetic behavior of spinel ferrites. The effect of the mutual influence of the content of various cations on the saturation magnetization and coercive force is determined.

The most influential factor is the content of cobalt cations. Coercive forces were found to be low for Mn-Zn and Co-Zn ferrites and high for the entire range of Co-Mn ferrites. An increase in the content of cobalt cations leads to an increase in the saturation magnetization value for Co-Mn ferrites. The EPR spectra show that the values of the resonance field and line width in the EPR spectrum correlate with the value of magnetic saturation.

1. V. Mameli et al., Journal of nanoscience and nanotechnology, 19, No 8: 4857-4887 (2019)
2. A. Hajalilou, S. A. Mazlan, Applied Physics A, 122, No 7: 680 (2016)
3. S. C. Tolani, A. R. Golhar, K. G. Rewatkar, AIP Conference Proceedings, 2104, No 1: 030032 (2019)

**Electronic structure and X-ray magnetic circular dichroism
in ferroelectric $\text{CaMnTi}_2\text{O}_6$**

V. N. Antonov,^{1,2} D. A. Kukusta,^{1,3} S. V. Moklyak,¹ D. V. Mazur,¹ L. V. Bekenov¹

¹*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the N.A.S. of Ukraine,
36 Vernadsky Street, 03142 Kiev, Ukraine*

²*University of Bialystok, K. Ciolkowskiego 1M,
PL-15-245 Bialystok, Poland*

³*Max-Planck-Institut für Festkörperforschung,
Heisenbergstr. 1, D-70569 Stuttgart, Germany*

We study the electronic and magnetic properties of ferroelectric as well as the x-ray absorption spectra and x-ray magnetic circular dichroism (XMCD) at the Mn, Ti $L_{2,3}$, and O K edges for $\text{CaMnTi}_2\text{O}_6$ within the density-functional theory using the generalized gradient approximation (DFT-GGA) with the consideration of strong Coulomb correlations (DFT-GGA+U) in the framework of the fully relativistic spin-polarized Dirac linear muffin-tin orbital band-structure method (LMTO).

A-site Mn^{2+} ions with high-spin states ($3d^5$) exhibit long-range AFM order in $\text{CaMnTi}_2\text{O}_6$. Due to different types of the oxygen atoms surrounding the Mn ions and different Mn-O intersite distances Mn_1 and Mn_2 possess different valences (1.85^+ and 2.25^+) and different magnetic moments ($4.527\mu_B$ and $-4.628\mu_B$ for Mn_1 and Mn_2 , respectively).

Due to the AFM ordering and different coordinations (tetrahedral at Mn_1 sites and pseudosquare planar at Mn_2) the XMCD spectra at the Mn L_3 edge have opposite signs and are shifted to each other producing the spectrum with a major peak and two high energy shoulders. The theory overestimates the intensity of the high energy peak. It can be explained by the fact that the calculations have been performed for the ideal crystal structure without possible lattice imperfections and without an external magnetic field. The external magnetic field might change the spin orientation of some Mn_2 ions, and as a result, the sum XMCD signal from the Mn_2 sites might be reduced.

Taking into account the core-hole effect has significantly improved the agreement with the experimental Ti XAS and XMCD spectra at the Ti, Mn $L_{2,3}$ and O K edges. The core-hole interactions strongly influences Ti and Mn empty $3d$ as well as O $2p$ states, they become much more narrow and shifted downward by several eV.

**Магнітом'які аморфні Со-сплави з низькою індукцією насичення
Носенко А.В.^(*), Кирильчук В.В., Бошко О.І., Євлаш І.К., Семирга О.М.,
Носенко В.К.**

*Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
м. Київ, бульвар Академіка Вернадського, 36, Україна
Тел.: +38 063 411 2079 E-mail: itrij@ukr.net

Аморфні металеві сплави (АМС) на основі кобальту вже десятки років мають промислове застосування в якості енергоефективних функціональних матеріалів: магнітопроводів, сенсорів та феродатчиків у різноманітних елементах вузлів електронної техніки. Це обумовлено низькою високих експлуатаційних властивостей, таких як: низькі втрати на перемагнічування в широкому частотному діапазоні, високі значення початкової магнітної проникності, наявність гігантського магнітного імпедансу, низький рівень шуму та близька до нуля магнітострикція. Хоча ці сплави і використовують давно, оптимізація властивостей цих АМС та пошуки ефективного впливу на ці властивості складу АМС, а, відповідно, і дослідження фізичних властивостей таких сплавів, залишаються актуальним і на сьогодні.

В АМС на основі кобальту можна змінювати форму петлі гістерезису, наводячи в них одновісну магнітну анізотропію термообробкою в магнітному полі та/або при відпалі під розтягувальними напруженнями. Це робить перспективним застосування магнітопроводів з них у різноманітних елементах та вузлах електронної техніки. В першу чергу при створенні магнітних сенсорів і прецизійних вимірювальних трансформаторів струму.

Досліджено термічну стабільність, магнітні та електричні властивості аморфних сплавів з відносно низькою індукцією насичення $\text{Co}_{67}\text{Fe}_3\text{Cr}_3\text{B}_{12}\text{Si}_{15}$, $\text{Co}_{66}\text{Fe}_3\text{Cr}_6\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ та $\text{Co}_{66}\text{Fe}_3\text{Cr}_9\text{B}_{14}\text{Si}_8$. Показано, що кристалізація стрічок цих сплавів починається з формування металічних Со фаз переважно на вмерзених центрах кристалізації, що містять атоми хрому. Виявлені певні закономірності аномальної поведінки температурної залежності електроопору стрічок досліджених сплавів. Встановлено оптимальні режими їх термічної обробки, при яких досягаються найвищі магнітні властивості. Виявлено, що сплави з високим вмістом хрому мають індукцію насичення 0,38Т - нижчу ніж сплав з низьким вмістом хрому $\text{Co}_{67}\text{Fe}_3\text{Cr}_3\text{B}_{12}\text{Si}_{15}$, в якому вона складає 0,45Т. Обговорені перспективи використання аморфних стрічок сплавів цієї системи в якості високочутливих сенсорів магнітного поля.

Critical current in superconductor/ferromagnet thin film multilayers

Kasatkin A.L., Shapovalov A.P. (*)

*G.V. Kurdyumov Institute of Metal Physics, NAS of Ukraine,
36 Vernadsky str., 03142 Kiev, Ukraine*

**Tel.: +38 0507144855 E-mail: shapovalovap@gmail.com*

Heterostructures formed by superconductor and ferromagnet layers (S-F) are of fundamental interest because at the interface between both materials a competition between different kinds of ordering phenomena occurs. Also these heterostructures look rather perspective for applications as superconducting composite materials with enhanced current-carrying abilities. The latter is due to an additional magnetic pinning potential $U_{mp} \sim \phi_0 \cdot M(r) \cdot d_s$ for Abrikosov vortices which is provided by inhomogeneous magnetization $M(r)$ of the ferromagnet film (d_s the thickness of the superconducting layer) in the S-F heterostructure. Essential role of magnetic pinning was suggested by Bulaevskii et al. [1] and observed in a number of experiments performed on different superconductor thin film structures, e.g. in YBCO/LCMO or YBCO/LSMO multilayers [2], where YBCO – is high- T_c superconductor ($\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$), and LCMO or LSMO are ferromagnetic manganite compound ($\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ or $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$).

In the present work we analyze the possibility of enhancement of the average critical current density in S-F multilayer structure produced on the base of HTS and manganite films. This class of materials is especially studied in relationship to YBCO thin films, as the two materials have an excellent structural compatibility, which allows for the epitaxial growth of heterostructures. We consider two possible issues for magnetic pinning of Abrikosov vortices in S-layers: a) magnetic pinning which arises due to the static inhomogeneous magnetization $M(r)$ caused by the quenched disorder in F-layer [1]; and b) due to the polaronic mechanism of vortex pinning in S-F multilayers suggested in [3]. In the presence of quenched disorder, the vortex lines adjust themselves to take the advantage of the pinning potential, which destroys the long-range lattice order. Below a threshold current, vortices remain pinned (actually they creep between pinning centers due to fluctuations). In this region, the polaronic mechanism does not play a role. When the current is high enough to depin the vortices from quenched disorder, the vortices start to move and the lattice ordering is enhanced. By formation of polarons with the nonuniformly induced magnetization, the vortex viscosity is enhanced. At a critical velocity (current), the polaron dissociates and the system jumps to the conventional Bardeen-Stephen flux-flow branch. Pinning due to quenched disorder works in the static region and polaronic pinning works in the dynamic region. The critical current of the whole system is the sum of these two threshold currents. We have analyzed conditions necessary for obtaining the maximal values of the critical current density in such a S-F multilayer heterostructure.

1. L.N. Bulaevskii, E.M. Chudnovskii, and M.P. Maley, Appl. Phys. Lett., 76, No.18: 2594 (2000). DOI: <https://doi.org/10.1063/1.126419>.
2. T. Petrison, M. Gabor, C. Tiusan, V. Galluzzi, G. Celentano, S. Popa, A. Boulle, and T. Petrison, J. Appl. Phys. 112, No.5: 053919 (2012). DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4748049>.
3. S.-Z. Lin and L.N. Bulaevskii, Phys. Rev. B, 86, No.6: 064523 (2012). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.064523>.

Vortex escape from the columnar pinning site in current-loaded anisotropic superconductor

Kasatkin A.L., Shapovalov A.P.^(*)

*G.V. Kurdyumov Institute of Metal Physics, NAS of Ukraine,
36 Vernadsky str., 03142 Kiev, Ukraine*

**Tel.: +38 0507144855 E-mail: shapovalovap@gmail.com*

Enhancement of the critical current density value in high- T_c superconductor (HTS) films and coatings at liquid nitrogen temperature, as well as reduction of its dependence on magnetic field and specimen thickness, is one of the major challenges toward their use in large-scale applications. The critical current density j_c value in superconductors depends on the material defect nanostructure ability to pin Abrikosov vortices and prevent them from motion which leads to the resistive state emergence and to the related electrical resistance. It is commonly assumed that the extended linear defects with radii comparable to the coherence length ξ of the superconducting state are the most effective pinning sites for vortices, ξ being about a few nanometers for the HTS materials [1].

In the present work the problem of Abrikosov vortices depinning from extended linear (columnar) defect in 3D-anisotropic superconductor film under non-uniformly distributed Lorentz force is studied for the case of low temperatures, disregarding thermal activation processes. We treat it as a problem of mechanical behaviour of an elastic vortex string settled in a potential well of a linear defect and exerted to Lorentz force action within the screening layer about the London penetration depth near the specimen surface. The stability problem for the vortex pinning state is investigated by means of numerical modelling and conditions for the instability threshold are obtained as well as the critical current density j_c and its dependence on the film thickness and magnetic field orientation [2]. The instability leading to vortex depinning from extended linear defect first emerges near the surface and then propagates inside the superconductor. This scenario of vortex depinning mechanism at low temperatures is strongly supported by some recent experiments on high- T_c superconductors (HTS) and other novel superconducting materials, containing columnar defects of various nature.

When the current density on the surface exceeds the critical value j_{0c} the stationary solution for the pinned vortex string vanishes. This corresponds to the loss of stability for the pinned vortex state and starting the vortex escape from a linear defect under the Lorentz force action. The dynamic of a vortex line evolution during its escape from the linear defect under the influence of overcritical current is described by the non-stationary nonlinear equation for the vortex string viscous motion, which can be easily obtained from Lagrange's equations for an elastic vortex string dissipative motion and generalizes the equation explored earlier in [2] for a stable curved vortex line within the pinning potential well of columnar defect in a current-loaded superconductor. When a vortex during its escape dynamics goes far enough from the defect it gets almost free from the pinning potential and travels evenly taking the stationary form of viscously moving elastic vortex string under the action of nonuniformly distributed Lorentz force. We have obtained the time of vortex escape from the columnar pinning site and explored its dependence on the specimen thickness and transport current values, which characterizes the delay of vortex depinning process and related response on applied strong current pulse.

1. W.-K. Kwok, U. Welp, A. Glatz, A.E. Koshelev, K.J. Kihlstrom, and G.W. Crabtree, *Rep. Prog. Phys.*, 79, No.11: 116501 (2016). DOI: <https://doi.org/10.1088/0034-4885/79/11/116501>.
2. V.A. Fedirko, A.L. Kasatkin, S.V. Polyakov, *J. Low Temp. Phys.* 192, No. 5-6: 359 (2018). DOI: <https://doi.org/10.1007/s10909-018-1986-0>.

Від’ємна диференційна провідність n-типу в вах надпровідних

MoRe-Si(W)-MoRe гетероструктур

Шаповалов А.П.^{1(*)}, Житлухіна О.С.²

¹*Інститут металофізики ім. Г.В.Курдюмова НАН України,
пр. Академіка Вернадського, 36, 03142, м. Київ, Україна*

²*Донецький фізико-технічний інститут ім. А. А. Галкіна НАН України, пр. Науки, 46,
03028, м. Київ, Україна*

**Тел.: +38 0507144855 E-mail: shapovalovap@gmail.com*

Постійний прогрес в мініатюризації напівпровідникової техніки і, зокрема, комп’ютерної пам’яті на нанорозмірному рівні потребує нових електронних пристроїв, здатних масштабуватись до надмалих розмірів. У нашій роботі ми запропонували та реалізували концепцію нового елемента для наноелектроніки на основі шаруватої структури з металевими електродами та композитним кремнієвим прошарком нанометрової товщини з вольфрамовими нанодотами. Ця структура має великий потенціал для виготовлення функціональних пристроїв, що демонструють характеристику від’ємної диференціальної провідності і інтеграцією високої щільності. Аналіз кривих диференціальної провідності від напруги показав, що це явище можна успішно описати за допомогою простої моделі дворівневих систем з надзвичайно великими параметрами асиметрії, як це передбачалося раніше в роботі [1].

Разом з тим, слід зазначити, що запропонована інтерпретація залишає невирішеним питання мікроскопічного походження ефекту від’ємної диференціальної провідності у наших зразках. Певну ідею, однак, можна отримати, перевібивши температурну поведінку запропонованих зразків, див. наші попередні результати [2]. Було встановлено, що ефект від’ємної диференціальної провідності в переходах MoRe/Si(W)/MoRe зникає при підвищенні температури вище T_c . Отже специфічний мікроскопічний механізм, який викликає падіння струму при певній напрузі і є відсутним у звичайному стані, має бути пов’язаним в даному випадку з деякою низькоенергетичною шкалою. Цілком природно пов’язувати різкі зміни провідності транспортного каналу з затримкою електронів у неглибоких локальних станах, які можуть утворитися на границі надпровідника і ізолятора [3]. Досліджена нами температурна залежність обговорюваного явища від’ємної диференціальної провідності свідчить про суттєвий вплив надпровідника на зв’язані стани в контакті з напівпровідником.

Робота виконана в рамках теми «Квантова динаміка квазічастинкових збуджень в металевих гібридних системах».

1. A. Halbritter, P. Makk, Sz. Csonka, G. Mihály, *Phys. Rev. B.*, **77**: 075402 (2008). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.075402>.
2. A. Shapovalov, V. Shaternik, O. Suvorov, E. Zhitlukhina, and M. Belogolovskii, *Applied Nanoscience*, **8**: 1025 (2018). DOI: <https://doi.org/10.1007/s13204-018-0687-y>
3. L. Faoro and L. B. Ioffe, *Phys. Rev. Lett.*, **96**: 047001 (2006). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.047001>

Надпровідникові переходи MoRe-Si(W)-MoRe в зовнішньому магнітному полі

Шатернік В.Є.^{1,*}, Суворов А.Ю.¹, Шаповалов А.П.^{1,2}

¹*Інститут металофізики ім. Г.В.Курдюмова НАН України,
пр. Академіка Вернадського, 36, м. Київ, Україна*

²*Інститут надтвердих матеріалів ім. В. М. Бакуля НАН України,
04074, вул. Автозаводська, 2, м. Київ, Україна*

*Тел.: +38 099 313 6113 E-mail: shaternik@imp.kiev.ua

Створено та експериментально досліджено гетероструктури MoRe-Si(W)-MoRe, що складаються з надпровідних обкладок (сплав молібдену з ренієм) та гібридного напівпровідникового тунельного бар'єру з нанорозмірного шару кремнію Si з нанокластерами вольфраму W в ньому. Дослідженню особливостей магнітопольових залежностей створених переходів Джозефсона MoRe-Si(W)-MoRe з металевими нанокластерами W, вміщеними в бар'єр з аморфного кремнію Si, і присвячена ця робота, оскільки через такі кластери в бар'єрі реалізується квазіодновимірний транспорт зарядів, що робить їх за властивостями подібними квазіодновимірним напівпровідниковим та металевим нанодротинкам, які зараз інтенсивно досліджуються в світі в якості базового елемента переходів Джозефсона нового типу.

При прикладанні зовнішнього магнітного поля H , паралельного площині переходу, в досліджуваних переходах спостерігалася слабо осцилююча залежність величини надпровідного критичного струму Джозефсона від магнітного поля $I_C(H)$, яка інтерпретується в рамках теоретичної моделі А.Л. Касаткіна із співавторами [1], як притаманна сітці паралельно включених надпровідникових наномістків, а також спостерігався новий ефект - ефект зростання в більшій, чи меншій мірі величини квазічастинкового струму через перехід $I_{q1}(H)$, на величину додаткового струму I_Δ .

Енергетичний спектр електрона в магнітному полі H в тривимірному випадку записується у вигляді

$$E(n, k_z) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (1)$$

тут ω_c – циклотронна частота. Тобто енергія квазічастинок всередині кластеру вольфраму збільшується при прикладанні зовнішнього магнітного поля H , в результаті утворюється нерівноважна заселеність рівнів енергії в кластері. Квазічастинки в бар'єрі знаходяться в колодязі між двома надпровідниками, тому вони не можуть релаксувати по енергії. Обговорюються особливості транспорту зарядів в досліджуваних гетероструктурах на базі моделей, які враховують нерівноважну заселеність рівнів та спін-залежний транспорт носіїв заряду в гетероструктурах, а також в рамках моделі слабкої локалізації носіїв Б. Альтшулера, А. Аронова, А. Ларкіна та Д. Хмельницького [2].

Робота виконана в рамках тем «Квантовий транспорт в гібридних надпровідникових наноструктурах і іонно-плазмових конденсатах та їх електромагнітні властивості» та «Наноінженерія нових високоефективних надпровідних і магнітних керамічних композиційних матеріалів та пліткових гетероструктур».

1 A. L. Kasatkin, V.E. Shaternik, O.Y. Suvorov, A.A. Kalenyuk, A.P. Shapovalov, Physica C 566: 13535 (2019). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physc.2019.1353539>.

2 B.L. Al'tshuler, A.G. Aronov, A.I. Larkin, and D.E. Khmel'nitskil, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 81: 768 (1981).

Structure and functional properties of superconducting

MgB₂ –based materials

T. A. Prikhna¹, V. V. Romaka², V.E. Shaternik³, M. Eisterer⁴, A.V.Shaternik¹, V. E. Moshchil¹, A.P. Shapovalov^{1,4} S. S. Ponomarov⁵

¹ V. Bakul Institute for Superhard Materials of the National Academy of Sciences of Ukraine, 2, Avtozavodskaya Str., Kiev 07074, Ukraine

² Lviv Polytechnic National University, 12 Bandera Str., Lviv, 79013, Ukraine

³ G.V.Kurdyumov Institute for Metal Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine (NASU), Vernadskii av., 36, Kyiv, 03142, Ukraine

⁴ Atominstitut, TU Wien, Stadionallee 2, 1020 Vienna, Austria

⁵ Institute of Semiconductor Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine (NASU), 41, Nauky Ave., Kyiv 03028, Ukraine

*Tel.: +38 044 424 1331 E-mail: shaternik@imp.kiev.ua

Superconducting materials based on MgB₂ are promising for many various applications such as fault current limiters, magnetic resonance imaging, superconducting magnetic energy storage devices, transformers, electrical motors and generators, cryogenic pumps, adiabatic demagnetization refrigerators, magnetic separators, magnetic levitation transport and bearings, magnets for high-energy physics. Superconducting MgB₂ wires can be used for aviation and space applications and for powerful offshore wind generators, etc.

MgB₂ is oxygen-free superconducting compound with hexagonal AlB₂ type of crystallographic lattice. It contains close packed Mg layers and graphenelike B layers alternate along the c axis of the hexagonal unit cell. MgB₂ shows a complex bonding structure consisting of ionic interlayer bonding and covalent/metallic mixed in-plane bonding. The XRD study demonstrates that the MgB₂-based materials usually contain MgB₂ phase and some admixture MgO phase even if special atmosphere is used during preparation for avoiding oxidation, what can be explained by high affinity of Mg towards oxygen. Besides, the presence of other admixture phases such as MgB₄ (orthorhombic), MgH₂ and BN, etc. can be observed on XRD patterns. But in MgB₂-based materials structures can be as well present dispersed inclusions of higher magnesium borides, MgB_x, with $x > 4$ (as SEM and Auger study witnessed), which cannot be revealed by XRD on the background of MgB₂ reflexes. The dispersed inclusions of the higher magnesium borides can be practically ‘invisible’ for a traditional XRD analysis.

Analysis of XRD patterns by Rietveld refinement has been shown that the main phase of superconducting MgB₂-based materials (with high level of superconducting characteristics) has AlB₂ type structure and near MgB_{1.8-1.68}O_{0.2-0.32} stoichiometry. The materials demonstrated j_c up to 0.9 – 0.4 MA/cm² (at 0 - 1 T, 20 K); B_{c2} , and B_{irr} up to 15 T at 22.5 K and 18 K, respectively. The *ab-initio* simulation confirmed (1) benefits in binding energy and enthalpy of formation if stoichiometry of the solid solution is near MgB_{1.75}O_{0.25}; (3) energetic advantage in case if impurity oxygen present only in each second boron plane of MgB₂ cell while the first boron plane of the same cell stays pristine and what can be explanation of two zone behavior of MgB₂ and (4) advantages from location of substituted oxygen atoms in the nearby positions in the same boron plane, i. e. formation of oxygen pairs or zigzags. Besides, the results of *ab-initio* modeling allow explanation of the tendency towards segregation of impurity O in MgB₂ structure during synthesis or sintering, and formation of Mg-B-O inclusions or nanolayers (with MgO type of structure) which effect pinning. Calculated transition temperatures, T_c , for MgB_{1.75}O_{0.25} occurred to be 23.3 K, while for MgB₂ it was 21.13 K only. Experimental T_c of the materials was 35.7-38.2 K.

Магніто механічні ефекти в аморфному сплаві $\text{Fe}_{73,0}\text{Cu}_1\text{Nb}_{3,0}\text{Si}_{15,8}\text{B}_{7,2}$

М.О. Васильєв, В.К. Носенко, В.М. Шиванюк, І.В. Загорулько

Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,

м. Київ, бульв. Академіка Вернадського, 36, Україна

**Тел.: +380 966725865 E-mail: zagorylko@ukr.net*

Феромагнітні аморфні сплави широко використовуються в якості магнітом'яких матеріалів, виробництво та експлуатація яких пов'язані з використанням зовнішніх магнітних полів (МП) різної напруженості. Отже, дослідження зміни їх структури та властивостей, які відбуваються під впливом магнітного поля, є важливими і актуальними. У даній роботі було досліджено магніто механічні ефекти в аморфному сплаві $\text{Fe}_{73,0}\text{Cu}_1\text{Nb}_{3,0}\text{Si}_{15,8}\text{B}_{7,2}$.

Аморфний сплав складу $\text{Fe}_{73,0}\text{Cu}_1\text{Nb}_{3,0}\text{Si}_{15,8}\text{B}_{7,2}$ у вигляді стрічок товщиною 25 – 30 мкм та шириною 15 мм отримували спінінгуванням розплаву. Аморфний стан одержаних стрічок контролювали методами рентгеноструктурного аналізу та просвічуючої електронної мікроскопії. Для обробки в МП аморфну стрічку поміщали у зазор між двома пластинами постійних магнітів, що забезпечують рівномірну напруженість поля (0,2 Тл) в місці розташування експериментального зразка. Після витримки в магнітному полі протягом заданого часу здійснювали вимірювання мікротвердості (10–15 хв.), після чого зразок знову поміщали в МП для подальшої витримки. Кількісно мірою магніто механічного ефекту у даній роботі була величина мікротвердості, яку вимірювали на стандартному приладі ПМТ-3 при навантаженні на індентор $p = 100$ г. Зміну хімічного складу поверхні і морфології аморфних стрічок після дії МП досліджували за допомогою растрового електронного мікроскопа марки VEGA3 SBU PEM. Для випробувань на розрив аморфних стрічок використовували розривну машину марки HOUNSFIELD моделі H5KT.

Було показано, що в залежності від часу витримки у магнітному полі (0,2 Тл) послідовно реалізуються два процеси: на початковому етапі експерименту (10 – 18 годин витримки) досліджуваний сплав знеміцнюється (тобто набуває підвищеної пластичності), але зі збільшенням часу експозиції до 90 год. його мікротвердість поступово зростає, перевершуючи початкові значення на ~15%. Межа міцності на розрив аморфної стрічки, витриманої у магнітному полі 90 год., також зростає на 15 % у порівнянні з аналогічним параметром вихідних зразків.

Методом растрової електронної мікроскопії було досліджено фрактографію поверхні розриву аморфних стрічок сплаву $\text{Fe}_{73,0}\text{Cu}_1\text{Nb}_{3,0}\text{Si}_{15,8}\text{B}_{7,2}$. Показано, що поверхня розриву вихідного зразка складається з двох зон (гладкої у об'ємі стрічки та «венозної» ближче до краю), у той час як структура поверхні витриманих у магнітному полі зразків повністю складається з «вен».

Вплив магнітного поля на зміну мікротвердості аморфного сплаву $\text{Fe}_{73,0}\text{Cu}_1\text{Nb}_{3,0}\text{Si}_{15,8}\text{B}_{7,2}$ можна пояснити акумуляцією і анігіляцією вільного об'єму, перерозподілом компонентів та релаксацією внутрішніх поверхонь аморфної стрічки, що пов'язано із розпадом або перебудовою кластерів.

**Features of excess conductivity and a possible pseudogap
in fese superconductors**

**Solovjov A. L.^{1,2(*)}, Omelchenko L. V.¹, Petrenko E. V.¹, Nazarova E.³,
Buchkov K.³, Rogacki K.⁴**

¹*B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of NAS of Ukraine, 47 Nauky Ave., Kharkov, 61103, Ukraine*

²*V.N. Karazin Kharkov National University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Svoboda Sq., Kharkov 61107, Ukraine*

³*Georgi Nadjakov Institute of Solid State Physics, Bulgarian Academy of Sciences, 72 Tsarigradsko shosse Blvd., 1784 Sofia, Bulgaria.*

⁴*Institute of Low Temperatures and Structures Research of Polish Academy of Science, ul. Okolna 2, 50-422, Wroclaw, Poland*

**Тел.: +38 057 341 0930 E-mail:solovjov@ilt.kharkov.ua*

The temperature dependence of the excess conductivity $\sigma'(T)$ in three polycrystalline samples of the $\text{FeSe}_{0.94}$ superconductor prepared by various technologies [1] was studied. Obtained from the measurements, the temperature dependences of the parameter $\Delta^*(T)$ which in cuprates is associated with a pseudogap, were analyzed in the model of local pairs. At high temperatures, all three samples exhibit a high narrow maximum $\Delta^*(T)$ at $T_{s1} \sim 250$ K, which is characteristic of magnetic superconductors. Below $T \approx 225$ K, the dependences $\Delta^*(T)$ become different. In almost the entire temperature range below T_{s1} , sample S2, prepared by the solid-state reaction method and not containing impurities, shows $\Delta^*(T)$, which is typical for Fe-pnictides [2]. An exception is the interval from the temperature of the structural transition $T_s = 85$ K to T_c , where $\Delta^*(T)$ exhibits an atypical broad maximum. An analysis of the obtained dependence indicates the opening of a pseudogap in this $\text{FeSe}_{0.94}$ sample below T_s . Sample S1, containing 4 wt.% Ag and S3, with a nominal composition but containing non-superconducting inclusions of the hexagonal phase, both obtained by partial melting, show identical $\Delta^*(T)$ but different from S2. They reveal a number of features that correlate with temperatures at which singularities are observed on $M(T)$, and the Hall coefficient $R_H(T)$ changes sign several times with decreasing T , indicating a change in the type of charge carriers in FeSe. The dependence $\Delta^*(T)$ of sample S3 below T_s has practically no maximum, since non-superconducting impurities of the hexagonal phase prevent the formation of paired fermions in S3 near T_c . As a result, S3 has a minimum density of local pairs $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = 0.26$, determined by comparing $\Delta^*(T_G)/\Delta_{\max}$ near T_c with the Peters – Bauer theory [3], and the dependence $\Delta^*(T)$ does not follow the theory. S1 has a maximal $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = 0.47$, most likely due to the influence of Ag impurities. S2 does not contain impurities, and found $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle \approx 0.3$ is the same as in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. Importantly, both dependencies $\Delta^*(T)$ for S1 and S2 follow the theory in a wide temperature range.

1. E. Nazarova, N. Balchev, K. Nenkov, K. Buchkov, D. Kovacheva, A. Zahariev, G. Fuchs. Supercond. Sci. Technol. 28, 025013 (2015) (in English). DOI:10.13140/RG.2.1.3687.4964.
2. A. L. Solovjov, L. V. Omelchenko, A. V. Terekhov, K. Rogacki, R. V. Vovk, E. P. Khlybov and A. Chroneos, Mater. Res. Express 3, 076001 (2016) (in English). DOI:10.1088/2053-1591/3/7/076001
3. R. Peters and J. Bauer, Phys. Rev. B 92, 014511 (2015) (in English). DOI:https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.014511

**Формування моноатомних шарів FeSe методом
молекулярно-променевої епітаксії**

Суворов О.Ю.^{1,2(*)}, Шаповалов А.П.¹

¹Інститут металофізики ім. Г.В.Курдюмова НАН України,
пр. Академіка Вернадського, 36, 03142, м. Київ, Україна

²Leibniz Institute for Solid State and Materials Research Dresden, Helmholtzstraße 20, Dresden,
01069 Dresden, Germany

*Тел.: +38 0668391017 E-mail: syvorovs@gmail.com

Серед усіх надпровідників на основі заліза найбільшу увагу привертає FeSe через просту кристалічну структуру і цікаві електронні та фізичні властивості. Надпровідність у FeSe з критичною температурою 8 К було відкрито у 2008 році у тетрагональній β -FeSe фазі з PbO структурою за атмосферного тиску [1]. Електронна структура FeSe, — найпростішого надпровідника на основі заліза (Fe-SC), — має потенціал різкого збільшення температури надпровідного переходу, який реалізується під тиском або в моно атомних плівках [2]. Така структура, завдяки своїй простоті, є ідеальною для теоретичних та експериментальних досліджень механізмів надпровідності у залізних надпровідниках. За допомогою вакуумного обладнання для молекулярно-променевої епітаксії Octopulus 300 було сформовано тонкі шари плівок Fe та Se на кристалічні підкладки SrTiO_3 . Було отримано дифракційну картину поверхні зразка підкладки та осаджених шарів за допомогою дифракції високоенергетичних відбитих електронів. (див. Рис.1 а-в). Як можна побачити вихідна поверхня підкладки має досконалу кристалічну структуру (про це свідчить наявність ліній Кікучі на Рис.1 а). Чітка дифракційна картина при осадженні Fe з'являється при осадженні більше 10 моношарів (Рис.1 б). Se при осадженні створює аморфну структуру — тому чітка дифракційна картина не спостерігається (Рис.1 в).

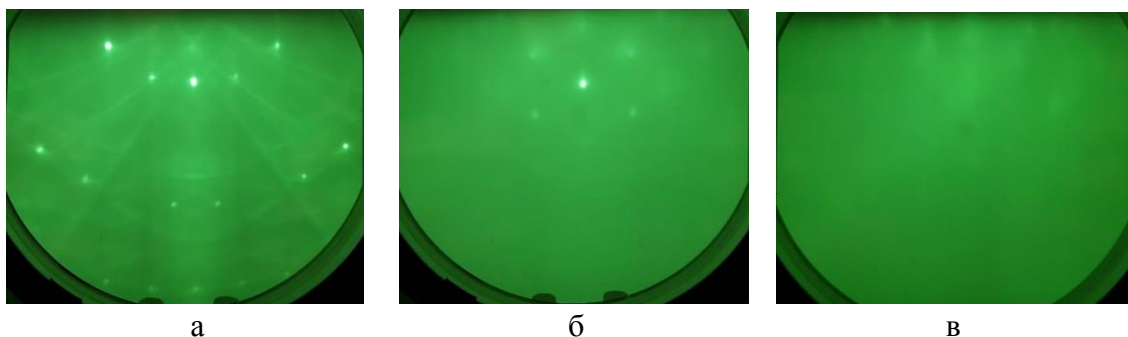


Рис.1. а) підкладка STO, б) Fe, осаджений на підкладку STO, в) Se, осаджений на підкладку STO

- 1 Y. Mizuguchi, F. Tomioka, S. Tsuda T. Yamaguchi, and Y. Takano, Appl. Phys. Lett., 93: 152505 (2008).
- 2 X. Liu, L. Zhao, S. He, J. He, D. Liu, D. Mou, B. Shen, Y. Hu, J. Huang, and X. J. Zhou, J. Physics Condens. Matter, 27, No. 18: 183201 (2015).

Power handling capability of microstrip fractal htsc resonator

Kalenyuk A.A.¹, Futimsky S.I.^{1(*)}, Kasatkin A.L.¹, Shapovalov A.P.¹

¹G.V.Kurdyumov Institute of Metal Physics, National Acad. Sci. of Ukraine,
36 Vernadsky blvd., 03142 Kiev, Ukraine

*Тел.: +38 044 424 11 31 E-mail: futimskysi@gmail.com

Superconducting thin film planar microwave structures, such as resonators and filters based on them, delay lines, antennas, are widely applied for objectives of modern microwave electronics. Usage of high-temperature superconducting (HTS) films as a material for the manufacture of planar microwave devices gives a significant advantage, e.g. a large increase in the resonators quality factor up to the order of 10^6 [1]. Novel type fractal geometry (e.g. in form of the Hilbert curve) used for these HTS thin film resonators makes them much more compact and attractive for applications in microwave filters and other more complicated HTS thin film microwave devices [2, 3].

In the present work we investigate the microstrip YBCO resonator in the form of a Hilbert fractal curve with a copper plate as a background. The amplitude-frequency characteristics, the resonance frequency values, and quality factors (Q-factor) for the first five resonant modes of fractal resonators were obtained in [3] in the linear operation regime (i.e., at minimal dependence on microwave power level). In the present work the nonlinear response of YBCO fractal fifth order Hilbert curve microstrip resonator was studied (fig 1). The resonator has a 0.1 mm line wide and 8.47×8.47 mm total size. The surface resistance of microwave resonator is proportional to $1/Q$. For common metals, the $1/Q$ value does not depend on incoming power ($1/Q(P_{in}) = \text{const}$). In the case of nonlinear response, this value becomes power depended. The nonlinear response for YBCO fractal resonator is demonstrated in fig 1 (b). At the minimal power value $P_{in} = (-40 \text{ to } -20)$ dbm the resonator operates in a linear regime. With increasing power at $P_{in} > -20$ dbm the resonator acquires nonlinear losses. The difference between linear and nonlinear resistance values is more than 10 times. We also note that at high power levels, the resonance peak loses its symmetry and the Lorentzian shape. This produces an error in measurements of Q-factor at high power levels. We suppose that these nonlinearity effects are related to the entry of microwave-induced vortices through the corners of the fractal curve where the *rf* current has a maximum density. We have performed theoretical and numerical modeling of this nonlinearity effects and argued that the negative effect of this type of nonlinearity for operation of passive microwave devices can be suppressed by smearing of the sharp corners of the fractal resonator and also by use of HTS films with inserted additional strong pinning sites, which prevents entry of microwave-induced Abrikosov vortices.

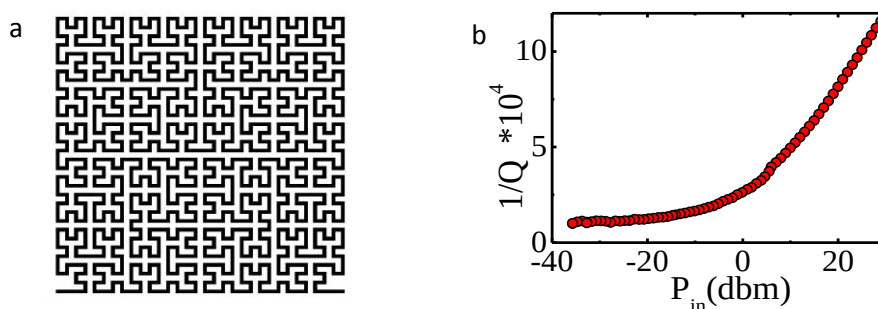


Fig.1. Design of YBCO Hilbert fractal microstrip YBCO 200nm thin-film resonator (a), and the nonlinear $1/Q$ power dependence at the temperature 78K (b).

1. A. Megrant, C. Neill, R. Barends, et.al., Appl. Phys. Lett. 100: 113510 (2012).
2. H. Yue, H. Tang, C. Wu, Q. Xie, C. Li, Physica C, 557: 1 (2019).
3. A. A. Kalenyuk and S. I. Futimsky, Metallofiz. Noveishie Tek

Heat capacity, DSC and Raman spectra of MWCNTS

**M.S. Barabashko^{1(*)}, D. Szewczyk², A. Jeżowski², M. Drozd², P. Gluchowski²,
M.I. Bagatskii¹, V.V. Sumarokov¹, A.N. Ponomarev³,
V.L. Kuznetsov^{4,5}, S.I. Moseenkov⁴**

¹*B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine 47 Nauky Ave., Kharkiv 61103, Ukraine*

²*W. Trzebiatowski Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences P.O. Box 1410, Wrocław 50–950, Poland*

³*Institute of Strength Physics and Materials Science of SB RAS, 2/4 Akademicheskii Ave., Tomsk 634055, Russia*

⁴*Boreskov Institute of Catalysis, 5 Lavrentiev Ave., Novosibirsk 630090, Russia*

⁵*National Research Tomsk State University, 36 Lenin Ave., Tomsk 634050, Russia*

* *E-mail: barabaschko@ilt.kharkov.ua*

Calorimetric, DSC and Raman studies of multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) were carried out. Three types of MWCNTs with average diameters of 7.2, 9.4, and 18 nm were obtained by the CVD method. MWCNTs contained more than 99.4 at.% carbon, the main impurity was the remainder of the catalyst (several tenths of at.%). The heat capacity of MWCNTs was measured by the relaxation method in the temperature range from 2 to 275 K by using PPMS [1]. In the temperature dependences of the specific heat of $C_p(T)$ for MWCNTs, size effects are observed. As the temperature decreases below 20 K, the $C_p(T)$ curves shift to lower values with an increase of the nanotube's outer diameters. Below 6 K, the $C_p(T)$ of MWCNT with a diameter of 18 nm approaches the $C_p(T)$ of graphite.

The kinetic processes in MWCNTs were studied at temperatures from room temperature to 500 K in a nitrogen flow using differential scanning calorimetry (DSC) on a Perkin - Elmer - 8000. It was found that exo- and endothermic peaks are not observed on the DSC curves. This indicates that all studied MWCNTs have a small number of defects, functional groups, and other impurities.

The Raman measurements were performed in backscattering geometry using a Renishaw InVia Raman microscope equipped with a confocal DM 2500 Leica optical microscope and a CCD detector. An Ar laser with a wavelength of 514 nm was used. In the Raman spectra of MWCNTs, defect-induced phonon mode so-called D band is observed at around 1346 cm^{-1} . The high-energy G mode (1572 cm^{-1}), due to vibrations of carbon atoms in the walls of the nanotubes, is shifted toward the lower frequencies compared to the G mode of graphite (1580 cm^{-1}). The 2D band related with the two-phonon scattering is observed near 2688 cm^{-1} . The dependence of the I_D/I_{2D} ratio on the average diameter of MWCNTs is in good agreement with the data of [2]. $I_D > I_{2D}$ for MWNTs with an average diameter $d < 15\text{ nm}$ and $I_D < I_{2D}$ for MWNTs with $d > 15\text{ nm}$.

1. V.V. Sumarokov, A. Jeżowski, D. Szewczyk, M.I. Bagatskii, M.S. Barabashko, A.N. Ponomarev, V.L. Kuznetsov, S.I. Moseenkov, The low-temperature specific heat of MWCNTs, *Low Temp. Phys.* 45(3), 347–354, (2019). [*Fiz. Nizk. Temp.* 45(3), 395–403 (2019)].
2. S.N. Bokova-Sirosh, V.L. Kuznetsov, A.I. Romanenko, M.A. Kazakova, D.V. Krasnikov, E.N. Tkachev, Y.I. Yuzuyuk, and E.D. Obratsova, *J. Nanophotonics* 10, 012526 (2016).

Charge current in metal/complex oxide memristors

Ochkan K.¹, Zhitlukhina E.^{2,3(*)}, Razmkhah S.⁴, Febvre P.⁴, Belogolovskii M.^{1,5}

¹Kyiv Academic University, 36 Academician Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv Ukraine

²O. O. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering of the N.A.S. of Ukraine, 46 Nauki Avenue, UA-03028 Kyiv, Ukraine

³Vasyl' Stus Donetsk National University, 21 600-richya Street, UA-21021 Vinnytsia, Ukraine

⁴Superconducting Electronics Group, IMEP-LAHC – CNRS UMR 5130, Université Savoie Mont Blanc, F-73376 Le Bourget du Lac Cedex, France

⁵G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the N.A.S. of Ukraine,

36 Academician Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv, Ukraine

*Тел.: +38 044 424 1331 E-mail: elena_zhitlukhina@ukr.net

Circuit elements retaining information of their past dynamics, e.g. memristors, are among the most promising devices able to cause a paradigm change in information processing and energy-efficient neuromorphic computing [1]. The resistance of a memristor depends on the history of electrical charges crossed through it, encoded in the physical configuration of the device. The last few years have witnessed significant developments in memristive junctions where an electric field is employed to switch from high- to low-resistive states. In spite of the great progress, many aspects of their current-voltage curves still remain unclear. In particular, the non-uniform spatial oxygen distribution near the interface of metal/complex transition-metal oxide bipolar devices based on a voltage-enhanced oxygen diffusion model is not yet well understood. Within this framework, the search of the microscopic factors that determine the electrical conduction properties through inhomogeneous interfaces is an important task to improve the resistance switching properties of devices [2].

In the present work, we interpret resistance hysteresis loops in metal/ YBCO ($\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-c}$) devices. The most probable mechanism of switching in the resistive memory elements is the change in the concentration of oxygen vacancies c that occurs in nanometer-scale regions near the interfaces. An interest of devices based on the YBCO compound well studied in the 90s is associated with their capacity to shed light on the electrical transport mechanisms through a metal/oxide interface. Our main concern is about the shape of current-voltage (I - V) curves in the two main states. We find that, within our model, the low-resistance region of the hysteretic I - V characteristic is ohmic while in the high-resistance mode the I - V dependence is strongly nonlinear. Following the paper [2], we plot the power exponent $\gamma = d\ln(I)/d\ln(V)$ as a function of $V^{1/2}$ and get a linear function that can be interpreted as an evidence of Poole-Frenkel charge transport. The latter mechanism is arising for Coulomb centers in the studied materials while in our approach such effects are ignored. It means that the related analytical formula has a wide range of applicability and is valid for extremely disordered interfaces with strong variations of local resistances.

This work was partly performed within a joint French-Ukrainian project supported by the French-Ukrainian Partenariat Hubert Curien (Project DNIPRO No. 37984RL) and the Ministry for Education and Science (MES) of Ukraine (Project M-62/2019). K. Ochkan, E. Zhitlukhina and M. Belogolovskii are deeply grateful to the International Mobility Credit (IMC) of the Erasmus+ Programme for support of their stay at the Université Savoie Mont Blanc.

1. F. Caravelli and J. P. Carbajal, *Technologies*, **6**, No. 4: 118 (2018). DOI: 10.3390/technologies6040118
2. L. F. Lanosa, H. Huhtinen, P. Paturi, and C. Acha, *J. Phys.: Condens. Matter.*, **32**, No.17: 175001 (2020). DOI: 10.1088/1361-648X/ab6b8b

Low heat resistance heat transfer element based on aluminum nitride films for high power LEDs

Rudenko E.M., Dyakin M.V., Korotash I.V., Polotsky D.Yu., Belogolovskii M.A.

G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, 03142, Kyiv, Ukraine

**Tel.: +38 095 155 30 66 E-mail: Max@imp.kiev.ua*

It is known that almost 75-80% of the electrical power brought into the LED is converted into heat, which must be removed. This is one of the main problems when creating devices based on high-power LEDs. One solution to this problem is to reduce the thermal resistance between the heat source and the environment. To reduce thermal resistance at the interface between two different media and provide an effective thermal interface, heat transfer elements with low thermal resistance based on special thermal interface materials (TIM) should be used.

This paper presents the results of studies of high-power LEDs in which aluminum nitride (AlN) films were used as IMT.

AlN films are characterized by high thermal conductivity, thermal expansion coefficient ($2,7 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$) and resistance to thermal shock, have excellent insulating characteristics. The heat transfer element is an aluminum substrate, the surface of which has been processed by a low-temperature high-energy plasma of a helicon source, with an aluminum nitride film deposited on it. The synthesis of AlN films was carried out in a single vacuum cycle in a helicon-arc ion-plasma reactor. The technological installation includes a helicon plasma source with an operating frequency of 13,56 MHz and plasma-arc accelerators combined in one technological chamber.

For research, experimental samples were made in which industrial LEDs White 280 Lm BIN1 with a power of 3W were installed on heat transfer elements with low thermal resistance. For comparison, samples were also made based on printed heat-conducting boards T-101-G, consisting of an aluminum base, an insulator - polyamide and copper foil.

The electrical and temperature characteristics of LEDs and thermal interface structures were studied using direct current sources by measuring the current-voltage characteristics of LED structures during their operation and comparing them with the reference family of current-voltage characteristics of the same device obtained at various crystal temperatures. The current-voltage characteristics were also studied at various load currents and different dissipation powers, and their thermal resistance and thermal conductivity were measured.

As a result of a comparison of the current-voltage characteristics, it was found that for White 280 Lm BIN1 LEDs mounted on a standard T-101-G printed circuit, under the action of a load current of 550 mA, a significant heating of the crystal is observed and its temperature rises to 65 - 75°C. at the same time, the same load current heats these LEDs mounted on a heat transfer element with a TIM AlN film only to 23-25°C (room temperature was about 14°C).

It was established that the thermal resistance of the created AlN-Al thermal interface is several times lower than the thermal resistance of industrial TIMs (in particular, Al prepregs), and the thermal conductivity of AlN ion-plasma condensates is tens of times higher than the prepreps.

So, the results obtained indicate that the use of an input element of heat transfer with low thermal resistance based on AlN films can effectively remove harmful heat from the LED, which will significantly improve the stability and durability of high-power LEDs.

Mechanical properties of silver nanotubes and nanowires

Filatov O.V.^{1,2}, Soldatenko O.M.^{2(*)}

¹*Physics of Atomic Transport Processes Department, G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the NAS of Ukraine. Academician Vernadsky Boulevard, 36, Kyiv-03142, Ukraine.*

²*Metal Physics Department, Faculty of Physical engineering, National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute". Prosp. Peremohy, 37, Kyiv-03056, Ukraine.*

**Tel.: +38 066 450 5443 E-mail: oksana.hubina2811@gmail.com*

Recently nanowires have been used extensively in composites for increasing the overall strength of a material. Now nanowires and nanorods continue to be actively studied, with research aiming to translate enhanced mechanical and physical properties to novel devices in the fields of [MEMS](#) or [NEMS](#). Some of them, for example, silver nanowires (NW) and nanotubes (NT), form a special sphere of interests. Both this nanostructures show similar thermal properties [1] and this properties very differ from their bulk counterparts. And what about mechanical properties?

Uniaxial tensile test was modelled to study mechanical properties of silver nanotube and silver nanowire using the molecular dynamics simulation. Diameter of nanowire was 3,7 nm and was the same as an external diameter of nanotube. The main axes of nanostructures coincided with the [110] direction of FCC lattice. Three atomic planes at the beginning and the same amount of atomic planes at the end of nanostructures were fixed. Fixed planes were displaced in the on-axial direction with the constant rate $1,25 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ for modelling of hydrostatic load. The temperature of investigation was 350 K.

Table 1 – Mechanical properties of silver nanotube and nanowire obtained by molecular dynamics

Nanotube	Nanowire
Tensile strength σ_t , GPa	
4,9±0,1	4,9±0,1
Young's modulus E, GPa	
96±5	85±5
Maximum elastic deformation e_t , %	
4,75	5,5

1. Filatov, O., Soldatenko, S., Soldatenko, O. The determination of temperature stability of silver nanotubes by the molecular dynamics simulation. *Appl Nanosci* 9, 853–857 (2019). DOI: <https://doi.org/10.1007/s13204-018-0770-4>

**Особливості температурних залежностей теплопровідності
молекулярних кристалів, що утворені лабільними молекулами**

Ю. В. Горбатенко, О. О. Романцова, О. І. Кривчіков, О. О. Корольок

*Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Веркіна НАН України
horbatenko@ilt.kharkov.ua*

Температурна залежність теплопровідності діелектричного орієнтаційно-впорядкованого кристалу має дзвоноподібний вигляд з яскраво вираженим максимумом в низькотемпературній області; при збільшенні температури теплопровідність демонструє обернено-пропорційну залежність від температури як $\kappa(T) = A/T + B$. При дослідженні температурних залежностей теплопровідності орієнтаційно-впорядкованих молекулярних кристалів бензофенонового ряду було виявлено аномальне зростання теплопровідності зі збільшенням температури, яке описували за допомогою рівняння Арреніуса: $\kappa_{TA}(T) = \kappa_0 \exp(-E/kT)$, де E - енергія активації. Показано, що аномальне зростання теплопровідності в цих речовинах зумовлене проявом термоактиваційного механізму теплопереносу, який пов'язаний з впливом внутрішньомолекулярних коливань на фононний спектр.

На прикладі молекулярного полікристалу пара-хлорнітробензолу, який був отриманий в орієнтаційно-розупорядкованій та орієнтаційно-впорядкованій фазах, показано, що зростання теплопровідності зі збільшенням температури має місце як в упорядкованих, так і в розупорядкованих фазах. Цей факт вказує на те, що прояв термоактиваційного механізму не залежить від ступеня впорядкування, а визначається внутрішньою будовою кристала. Показано, що зростання теплопровідності є характерним для молекулярних кристалів, що утворені лабільними молекулами.

1. 1 Yuliia V. Horbatenko, Olesia O. Romantsova, Oksana A. Korolyuk, Andrzej Jezowski, Daria Szewczyk, Joseph Ll. Tamarit, Alexander I. Krivchikov, Journal of Physics and Chemistry of Solids 127, 151–157 (2019).

**Вплив наночастинок магнетитів і феррооксидів на властивості
нанокомпозитів на основі поліепоксидів**

Старокадомский Д.Л.¹, Кохтич Л.М.^{2,3(*)}, Решетник М.⁴, Рассохін Д.⁵.

¹ Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України, вул. Генерала Наумова, 17, 03164
Київ, Україна

² Інститут фізики НАН України, проспект Науки, 46, 03028 Київ, Україна;

³ Національний технічний університет «Київський політехнічний інститут
ім.І.Сікорського», 03506 Київ, проспект Перемоги, 37

*E-mail: kokhtych@gmail.com

⁴ Національний науково-природничий музей НАН України, вул. Богдана
Хмельницького, 15, 01030 Київ, Україна

⁵ Приазовський державний технічний університет ДВНЗ "ПДТУ", вул.
Університетська, 7, 87555, м. Маріуполь, Україна

Залізовмісні епоксидні композити знаходь широке застосування в галузях промисловості, що вимагають специфічних властивостей клеїв і полімеркомпозитів – магніточутливих, теплопровідних або наближених за властивостями до залізу і його сплавів. Значною мірою вони потрібні при ремонті відколів і ефектів обладнання, коли методи зварювання складні, дорогуваті або неприпустимі. Розмірність частинок наноманетитів не дозволяє вводити їх багато в епоксидну смолу і вже при 5-10 мас.% композиція значно втрачає експлуатаційні характеристики. При цьому відбувається ряд структурних змін, які можуть істотно змінювати результуючу міцність матеріалу.

Відомо, що епоксидні композити, ефективно суміщаються із залізними мікро та нанорозмірними частинками у порошкоподібному стані. При цьому середовища, інкорпоровані вказаними частками, набувають кращих експлуатаційних та нових властивостей, наприклад підвищення показників міцності за різних умов обробки.

Для випробувань була використана італійська смола EPOSiR-7120, яка відрізняється термостійкістю полімеру, як при низьких так і при високих температурах. В якості наповнювачів використано: нанорозмірний ферит ітрієвий, магнетит, промисловий сурік, тонер магнітний.

З використанням оптичної мікроскопії показано, що наявність часток магнетитів та феррооксидів приводить до каркасоподібних утворень, які в свою чергу можуть посилювати міцність. За допомогою зображень АСМ-мікроскопії виявлено, що зміна морфології поверхні відбувається після наповнення та укрупнення неоднорідностей структури.

Отримані дані вказують на незначний вплив 5 мас.%- наповнення на міцність при стисканні, як при звичайній обробці отверділих композитів (50-60 °С), так і після витримки в агресивних умовах (250 °С чи витримка у рідині). Подібний вплив даних наповнювачів отримано при оцінці міцності композитів на згин. Модуль пружності (як при стиску так і при згині) може посилюватися на 10-15% після наповнення. Слід відвітити, що наповнення вказаними частинками дозволяє суттєво (у 2-2,5 рази) посилити вогнестійкість результуючих структур.

Таким чином, вказані результати відкривають шлях до технологій створення магніточутливих полімерних композитів із заданими параметрами.

Формування багатошарових пористих наносистем Zn/ZnO і Zn/ZnO/NiO

Корнющенко Г.С.^(*), Шевченко С.Т., Наталіч В.В., Перекрестов В.І

Сумський державний університет, вулиця Римського-Корсакова, 2,

Суми, Україна

**E-mail: a.kornyushchenko@mss.sumdu.edu.ua*

Пористі наносистем на основі оксидів металів привертають значний науковий інтерес завдяки перспективам їх використання в якості анодів літій-іонних акумуляторів. До останніх відносяться головним чином оксиди Zn і Ni та композити на їх основі [1-2].

У роботі пропонується технологія отримання двошарових і тришарових пористих систем Zn/ZnO і Zn/ZnO/NiO. На першому етапі розглянуто структуроутворення базових пористих систем Zn в процесі близькорівноважної стаціонарної конденсації, а також розглянуті деякі аспекти управління цим процесом за допомогою самоорганізації незмінних в часі малих пересичень конденсуючих парів.

При отриманні пористих систем Zn спочатку на підкладки з лабораторного скла за допомогою двох магнетронних розпилювачів наносилися двошарові контактні площинки на основі Cr і Au. Загальна товщина контактних площинок становила 0.8 мкм. Необхідність попереднього нанесення контактних площинок обумовлена тим, що механізм зародження пористих структур Zn і подальшого їх нарощування залежать від природи поверхні підкладки. Отже, маючи на увазі перспективу використання пористих шарів в якості електродів літій-іонних акумуляторів, їх формування необхідно проводити на підкладках з провідним шаром.

На наступному етапі на контактних площинках були отримані пористі шари Zn трьох типів. Для цього була використана розроблена авторами методика магнетронного розпилення цинку і подальша конденсація його парів поблизу термодинамічної рівноваги [3-5]. При реалізації гранично слабких пересичень утворюються пористі структури Zn у вигляді пов'язаних нанониток, а при поступовому підвищенні пересичення спостерігається перехід до утворення пористих структур на основі об'ємних кристалів.

Показано, що неповне окиснення базових шарів Zn або нанесення на шари Zn плівки його оксиду, а також плівки NiO, підвищують поперечний опір пористих систем Zn/ZnO або Zn/ZnO/NiO тільки на два або три порядки, що є важливим для практичного застосування отриманих шарів в якості електродів літій-іонних акумуляторів. За допомогою растрової та просвічувальної електронної мікроскопії, а також методу енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії та рентгенофазового аналізу оптимізовані фазовий і елементний склади, а також структурно-морфологічні характеристики складових шарів Zn/ZnO і Zn/ZnO/NiO.

- 1 J. Tarascon, M. Armand, Nature, 414: 359 (2001). <https://doi.org/10.1038/35104644>
- 2 J. Y. Xiang, X. L. Wang, X. H. Xia, J. Zhong, J. P. Tu, J. Alloys Compd., 509: 157 (2011) <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2010.09.013>
- 3 V. I. Perekrestov, A. I. Olemskoi, A. S. Korniyushchenko, Yu. A. Kosminskaya, Phys. Solid State., 51: No. 5: 1060 (2009). DOI: 10.1134/S1063783409050266
- 4 V.M. Latyshev, A.S. Korniyushchenko, V.I. Perekrestov, J. Nano- Electron. Phys., 6: No. 4: 04023 (2014) (in Russian).
- 5 A. S. Korniyushchenko, A. H. Jayatissa, V.V. Natalich, V.I. Perekrestov, Thin Solid Films, 604:48 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2016.03.017>

Формування багатошарових композитних захисних покриттів на основі С, Al, Cr, Hf, Mo, Ta, Ti, W

Перекрестов В.І., Космінська Ю.О.^(*), Ганніч Ю.В., Корнющенко Г.С.

Сумський державний університет, вул. Р.-Корсакова, 2, м. Суми, Україна

*Тел.: +38 0542 687 767 E-mail: y.kosminska@phe.sumdu.edu.ua

Для покращення експлуатаційних характеристик конструктивних елементів в атомній енергетиці існує завдання розробки та вдосконалення технології формування покриттів на внутрішній поверхні труб відносно малого діаметру із підвищеними захисними властивостями за умови дії на покриття несприятливих факторів. Серед існуючих варіантів захисних покриттів представляють інтерес багатокомпонентні та багатошарові покриття на основі системи металів, їх нітридів або карбідів. Такі покриття здатні гнучко забезпечити комплекс експлуатаційних властивостей покриттів відповідно до потреб, і в тому числі стійкість до дії потоків заряджених частинок [1, 2]. Таким чином, метою цієї роботи є розробка іонно-плазмової технології нанесення багатошарових багатокомпонентних покриттів на внутрішню поверхню труби діаметром 39 мм із використанням такої системи складових хімічних елементів як С, Al, Cr, Hf, Mo, Ta, Ti, W.

Основу розробленої технології складає запатентована іонно-плазмова розпилювальна система, конфігурація якої базується на елементах магнетронного розпилення на постійному струмі та ефекті пустотілого катода. До цього часу для нанесення багатокомпонентних карбідних або нітридних покриттів шляхом традиційного магнетронного розпилення використовували атмосферу суміші газів ($\text{Ar}+\text{N}_2$ або $\text{Ar}+\text{CH}_4$), сплавні мішені та/або композицію із багатьох однокомпонентних, рідше складених мішеней. Запропонований розпилювач містить одну мішень, що представляє собою стрижень діаметром 11 мм, складений із однокомпонентних дисків у такій послідовності $\text{Cr}-\text{W}-\text{Mo}-\text{Ta}-\text{Hf}-(\text{Ti}-\text{C})_x-\text{Ti}/\text{Al}-\text{C}$. Необхідно зазначити, що у зв'язку з високими робочими температурами (більше 600 °С) замість чистого алюмінію використовувався стоп ВТ6. Також можлива варіація набору елементів та геометричних розмірів складових частин. Розпилення стрижня відбувається в атмосфері високочистого аргону з тиском 5 Па та за потужності розряду ~ 380 Вт. Коаксіально стрижню розміщується рухома труба, на внутрішню поверхню якої наноситься покриття. Із метою подальших досліджень структурно-фазового стану, елементного складу, морфології та фізичних властивостей покриттів уздовж труби розміщуються підкладки. За рахунок переміщення труби уздовж осі розпилювача покриття формуються багатошаровими, градієнтними, зі зміною елементного складу в напрямку $\text{Cr} \rightarrow \text{W} \rightarrow \text{Mo} \rightarrow \text{Ta} \rightarrow \text{Hf} \rightarrow \text{Ti} \rightarrow \text{C} \rightarrow \text{Ti}/\text{Al} \rightarrow \text{C}$. Встановлено, що зміна елементного складу у зазначеному напрямку супроводжується переходом від карбіду суміші металів із середніми розмірами зерен декілька нанометрів до TiC із розмірами зерен ~ 8–15 нм. Одночасно із зазначеними структурними змінами відбувається збільшення шорсткості поверхні покриттів. Водночас установлено підвищення мікротвердості покриттів до ~ 26 ГПа, що визначається додатковим розігрівом поверхні росту тепловим випромінюванням стрижня, розігрітого іонами, та елементним складом прошарків композиту.

1. V. V. Uglov, G. Abadias, A. Y. Rovbut, S. V. Zlotski, I. A. Saladukhin, V. A. Skuratov, and S. Petrovich, Nucl. Instrum. Meth. B., 354: 269 (2015). DOI: 10.1016/j.nimb.2014.11.012.

2. A. D. Pogrebnjak, I. V. Yakushchenko, O. V. Bondar, O. V. Sobol', V. M. Beresnev, K. Oyoshi, and Y. Takeda, Tech Phys Lett+, 41, No. 11: 1057 (2015). DOI: 10.1134/S1063785015110085.

**Структурутворення багатокомпонентних покриттів на основі
Cr, Hf, Ti, Ta, W, Zr та вуглецю, сформованих розпиленням
стрижневої складеної мішені**

Пережестов В.І., Космінська Ю.О.^(*), Ганніч Ю. В.

Сумський державний університет, вул. Р.-Корсакова, 2, м. Суми, Україна

**Тел.: +38 0542 687 767 E-mail: y.kosminska@phe.sumdu.edu.ua*

На даний час проводиться активний науковий пошук розв'язання проблеми зі створення «стійкого до аварій толерантного палива» або Accident Tolerant Fuel (ATF). Одним із можливих варіантів розв'язання зазначеної проблеми є нанесення покриттів на поверхню оболонок ТВЕЛів. Для цього часто використовують покриття з таких компонентів як Cr, Zr, Ti, Hf, Ta, W та вуглець [1–4]. Екстремальні умови функціонування покриттів в атомному реакторі та потреба мати відповідний цьому комплекс властивостей покриттів вказують на необхідність їх багатошарової та багатокомпонентної будови з необхідним функціональним наповненням кожної складової. Маючи це на увазі, мета цієї роботи полягає в створенні та апробації принципово нової системи іонно–плазмового розпилення для формування захисних покриттів у вигляді багатошарового градієнтного композиту із зазначених металів та вуглецю, дослідження їх елементного складу, структурно–фазового стану та механічних властивостей.

Для отримання покриттів авторами був розроблений пристрій іонно–плазмового розпилення, у якому розпилювальна мішень представляє собою пакет з пластин Cr, Zr, Ti, Hf, Ta і W, закріплених у заглибленнях графітової основи. На відміну від традиційних розпилювачів магнетронного типу, в запропонованому розпилювачі реалізований рівномірний розподіл потоків іонів аргону, що розпилюють поверхню мішені. Це досягається поєднанням між собою ефекту пустотілого катоду та магнетронного ефекту. Шляхом паралельного переміщення підкладок відносно мішені можна прогнозовано отримувати багатокомпонентні градієнтні композити з необхідними функціональними можливостями.

Установлено, що отримані в роботі покриття характеризуються градієнтною зміною елементного складу та відповідною зміною структури, що залежить від місця розташування підкладки відносно розпилювальної мішені. Зміна відбувається у напрямку від підвищеної концентрації хрому та ОЦК–гратки до ГЦК–гратки карбіду суміші металів з одночасною непропорційною зміною міжплощинних відстаней та інтенсивності дифракційних максимумів. За умови переміщення підкладкотримача з підкладками під час розпилення паралельно поверхні мішені можна одержати багатошарове покриття із відповідною градієнтною зміною складу та структури за товщиною. Отримані покриття мали дрібнодисперсну будову з розмірами зерен до ~ 10 нм. Максимальна мікротвердість покриттів складала 28 ГПа. Маючи на увазі відому на цей час інформацію щодо радіаційної стійкості покриттів, а також виходячи з мікротвердості та розподілу елементного складу за товщиною в отриманих композитах, можна прогнозувати можливість використання останніх як конструкційних матеріалів атомної енергетики.

1. J.–C. Brachet, A. Billard, F. Schuster, et al, FR patent 3025929 A1. № 1458933; fi 1. 17.09.2014; publ. 21.10.2016. P. 43.
2. А. С. Куприн, В. А. Белоус, В. В. Брык и др., ВАНТ, 2, No. 96: 111 (2015).
3. J. Bischoff, C. Delafoy, C. Vauglin et al., Nucl. Eng. Technol., 50, No. 2: 223 (2018). DOI: 10.1016/j.net.2017.12.004.
4. A. D. Pogrebnjak, S. O. Bor'ba, Y. O. Kravchenko, E. O. Tleukenov, C. V. Plotnikov, V. M. Beresnev, A. I. Kupchishin, J. Superhard Mater., 38, No. 6: 393 (2016). DOI: 10.3103/S1063457616060034

Spectral Peculiarities of Merocyanine Dyes Films

Pavlenko O. L.¹, Dmytrenko O. P.¹, Gaponov A. M.¹, Kulish M. P.¹

Pundyk I.P.¹, Kachkovsky O. D.², Kurdiukov V. V.³, Lesiuk A.I.¹, P.Kobzar¹

1 Department of physics of functional materials, Physics Faculty, National Taras Shevchenko University of Kyiv, Glushkova prosp., 4, Kyiv-03039, Ukraine.

E-mail: lesiuk.andrey@gmail.com

2 V.P. Kukhar Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, Murmanska st., 1, Kyiv-02094, Ukraine.

3 Institute of Organic Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, Murmanska st., 5, Kyiv-02660, Ukraine.

Optical properties of merocyanine dyes films prepared by spin-coating on the glass substrates were studied. Spectra for solutions and films are characterized by different maxima due to interaction of the molecular chromophores and functional groups. Quantum-chemical modeling of interaction between the dyes, calculations of equilibrium geometry, charge distribution and electronic states were carried out.

Absorbance of films of merocyanine dyes prepared by spin coating on the films comparing to the spectra in solution undergoes to the following changes: absorption maximums shift towards red region and new wide maxima appear; absorption intensity of the main peak decreases. The first one is caused by interaction of the considered molecules due to alternation of atomic charges on the molecular chromophores. As a result of that J- and T-type aggregates are formed, which is confirmed by quantum-chemical calculations. According to the obtained data T-aggregation prevails. Therefore, merocyanine dyes in films absorb more wide spectral region, which is useful for harvesting of solar energy in order to transform it into electricity power in solar elements of organic electronics.

Напівпровідникові наноматеріали Pd/SnO₂ для створення газових сенсорів

Олексенко Л.П., Максимович Н.П., Матушко І.П.^(*),
Федоренко Г.В., Луценко Л.В.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка,

вул. Володимирська 64/13, м. Київ 01601, Україна

**Тел.: +38 044 239 3228 E-mail: mipigor@gmail.com*

На сьогоднішній день розробка нових функціональних наноматеріалів є надзвичайно актуальною, зокрема, для створення напівпровідникових сенсорів, призначених для вимірювання концентрації токсичних та вибухонебезпечних газів у повітрі. Такі сенсори необхідні для контролю стану повітря оточуючого середовища та робочих зон підприємств. На сьогодні, зокрема, особливої актуальності набуває створення високочутливих, низькотемпературних та стабільних напівпровідникових сенсорів призначених для вимірювання вибухонебезпечного водню, який широко використовується для хімічного синтезу в промисловості та в якості екологічно чистого енергоносія в водневій енергетиці.

Перспективними для створення таких сенсорів є напівпровідникові матеріали на основі діоксиду олова, що допований каталітично-активними добавками, які сприяють збільшенню швидкості каталітичної реакції окиснення H₂, киснем, що хемосорбований на газочутливій поверхні сенсора. Серед таких добавок доцільним є використання паладію, як активного каталізатора окиснення H₂.

Газочутливі Pd-вмісні наноматеріали з різним вмістом паладію одержували на основі SnO₂, що був синтезований золь-гель методом. Для цього з отриманого нанорозмірного SnO₂ готували пасту з додаванням розчину карбоксиметилцелюлози. Пасту наносили на керамічні плати сенсора розміром 2x2x0,3мм, які мали платиновий нагрівач для забезпечення певної температури сенсора. Паладій вводили у склад сенсора просочуванням його газочутливого шару розчинами PdCl₂ різної концентрації.

Для запобігання укрупнення частинок наноматеріалу в процесі його формування було запропоновано оптимальний високотемпературний режим спікання сенсорів до 620 °С, який дозволив отримати наноматеріали з розміром частинок 10-11 нм.

Виявлено, що створені сенсори, які тестували при різних потужностях нагрівачів сенсорів, виявили високу чутливість до мікроконцентрації водню (40 ppm) у повітрі. Встановлено, що залежності величин електричного опору у повітрі та чутливості до 40 ppm H₂ сенсорів від вмісту в них паладію при різних потужностях нагрівача (0,2 - 0,5 Вт) мають екстремальний характер, що визначається насамперед кількістю кисню, що хемосорбується на спільних активних центрах, утворених частинками діоксиду олова та паладію.

Для сенсорів на основі Pd/SnO₂ встановлено лінійну залежність їх провідності від концентрації водню в діапазоні 2 – 1089 ppm H₂, що є важливим для застосування сенсорів на практиці у складі газоаналітичних приладів. Визначено, що найчутливіші до H₂ паладійвмісні сенсори є динамічними: при потужності нагрівача 0,35 Вт вони мають час швидкодії 3 сек, і час релаксації 7 сек. Експериментально показано, що протягом 6 місяців випробувань стабільності сенсорів величина їх чутливості до водню була практично постійною, як для сенсорів на основі Pd/SnO₂, так і без добавок паладію.

Встановлено, що сенсори, створені на основі наноматеріалів Pd/SnO₂, мають значно вищу чутливість до 40 ppm H₂, ніж Pd-вмісні сенсори, розроблені на основі мікрокристалічного діоксиду олова, одержаного методом осадження, що є наслідком впливу нанорозмірного ефекту на властивості газочутливого наноматеріалу сенсорів.

**Селективні процеси при формуванні пористих
наносисем вуглецю**

Корнющенко Г.С., Наталіч В.В.^(*), Шевченко С.Т., Перекрестов В.І

Сумський державний університет, вулиця Римського-Корсакова, 2, Суми, Україна

**E-mail: vv.natalich@med.sumdu.edu.ua*

Розвиток портативної розумної електроніки, електромобілів, відновлюваних джерел енергії потребує високоефективних акумуляторних джерел. До останніх, перш за все, слід віднести літій-іонні батареї. Поряд з цим постійно зростаючий попит на сучасні джерела енергії з високими експлуатаційними характеристиками стимулюють розробку технологічних підходів, необхідних для створення нових акумуляторних матеріалів та структур. Зокрема, нановуглецеві наносистеми привертають значну увагу, як перспективні електроди літій-іонних батарей [1-4].

У роботі розглянуті селективні процеси, пов'язані з ростом пористих структур вуглецю при використанні розпилювального пристрою, що працює на основі ефекту порожнистого катода і магнетронного ефекту. Потік осаджуваного вуглецю був отриманий при використанні парів ацетону в якості робочого газу. В силу рекордно низького значення тиску рівноважного пару для вуглецю, прояв процесів селективності досягався за допомогою його високотемпературної конденсації (1500-1600°C) на підкладки з танталу в графітовому катоді. При цьому осаджуваний потік вуглецю, в основному, формувался за допомогою розкладання під дією розряду парів ацетону, тиск яких у вакуумній камері становив 3000 Па. Варіюючи діаметр порожнистого катода при осадженні вуглецю, можна змінювати конфігурацію внутрішнього електричного поля і ступінь концентрації плазми, що впливає на характер формування конденсатів. У зв'язку з цим особливий інтерес представляють дослідження закономірностей структуроутворення шарів вуглецю залежно від діаметра вхідного отвору катода, що і покладено в основу проведення експерименту.

Таким чином, використання різних геометричних характеристик порожнистого катода дозволяють отримати пористі конденсати графіту з різними морфологічними характеристиками. У міру поступового зменшення діаметра отвору катода ажурна форма шарів поступається більш вираженою стовпчастою структурою, причому поступово відбувається перехід від стовпів, сконденсованих в ряди, до стовпів, віддалених один від одного на деякій відстані. При цьому просторово розподілена селективність зародження і зростання стовпчастих структур графіту визначається флуктуаціями напруженості електричного поля над ростової поверхнею. Як показав рентгенофазовий аналіз, осаджені на танталові підкладки конденсати складаються з гексагонального текстурованого графіту, під яким знаходиться відносно товстий і, як потім було встановлено, досить твердий шар, що має ГЦК-решітку $\text{TaC}_{0.7}$.

1. B. Scrosati, J. Garche, J Power Sources, 195: No. 9: 2419 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2009.11.048>
2. Y. Gogotsi, Nature, 509: 568 (2014). <https://doi.org/10.1038/509568a>
3. W. Liu, M.S. Song, B. Kong, Y. Cui, Adv. Mater., 29: 1603436 (2017). DOI: 10.1002/adma.201603436
4. H. Sun, Z. Xu, C. Gao, Adv. Mater. 25: 2554 (2013). DOI: 10.1002/adma.201204576

Дослідження впливу швидкості охолодження на термічну стійкість аморфного стану комплексно легованих сплавів на основі заліза

Носенко В.К., Нізамєєв М.С.

Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,

м. Київ, бульв. Академіка Вернадського, 36, Україна

*Тел.: +38 097 781 82 99 E-mail: nizameev@imp.kiev.ua

За допомогою метода диференціальної скануючої калориметрії було досліджено вплив швидкості охолодження на термічну стійкість аморфного стану сплавів $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{5.3}\text{Cr}_{16.6}\text{W}_{3.9}\text{Mo}_{10.5}\text{Mn}_{0.2}\text{B}_4\text{C}_{14.9}\text{Si}_{1.7}\text{Al}_1\text{Y}_{1.9}$ (НВСУ-1-1) та $\text{Fe}_{43.6}\text{Co}_{5.4}\text{Cr}_{15.9}\text{W}_{3.9}\text{Mo}_{7.9}\text{Mn}_{0.6}\text{B}_{9.8}\text{C}_{9.8}\text{Si}_{0.1}\text{Al}_1\text{Y}_2$ (НВСУ-2-1), що були отримані у вигляді стрічок та об'ємних зразків (прутків та пластинок). Вихідні сплави виготовляли з хімічно чистої сировини методом електродугової плавки. Швидкозагартовані зразки отримували методом спінінгування (стрічки) та ежектуванням у мідну форму (масивні зразки) в атмосфері гелію.

Об'ємні зразки продемонстрували зниження термічної стійкості аморфного стану, що, скоріш за все, пов'язано з меншою швидкістю охолодження, у порівнянні з стрічками. Основну роль у цьому можуть грати «гартівні» зародки, об'ємна щільність яких зростає при зменшенні швидкості охолодження.

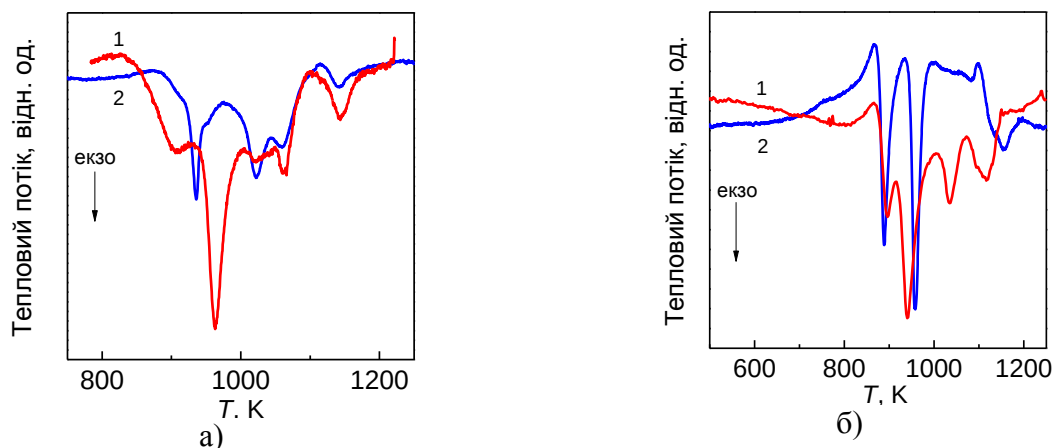


Рисунок 1. Порівняння термограм ДСК аморфних стрічок (червоні криві - 1) та пластинок (сині криві - 2) сплавів: НВСУ-1-1 (а) та НВСУ-2-1 (б).

З порівняння ДСК-термограм стрічкових та масивних зразків сплавів НВСУ-1-1 та НВСУ-2-1, які наведені на рис. 1, можна зробити висновок про відмінності структури вихідного нерівноважного стану, що сформувався під час охолодження з розплаву.

За допомогою метода Кісінджера були розраховані ефективні енергії активації для кожної стадії кристалізації. Енергії активації кожної із чотирьох стадій процесу кристалізації для об'ємних зразків сплаву НВСУ-1-1 є на 18, 20, 34 та 47 % меншими за відповідні величини для аморфних стрічок однакового хімічного складу. Для об'ємних зразків сплаву НВСУ-2-1 (з меншим вмістом вуглецю і кремнію і більш ніж вдвічі вищим вмістом бору порівняно із сплавом НВСУ-1-1) характерним є відсутність 3 і 4-ї стадій перетворення та зменшення енергії активації першої та останньої стадій нанокристалізації приблизно на 26% порівняно з аморфною стрічкою аналогічного хімічного складу. Збільшення різниці енергій активації на різних стадіях нанокристалізації свідчить про суттєво вищий вміст кластерів (вморожених центрів) борокарбідних сполук в об'ємних аморфних зразках, що є наслідком меншої на 4 порядки швидкості їх охолодження порівняно з аморфними стрічками.

Transport properties of layered ternary transition-metal chalcogenides

Ochkan K.¹, Belogolovskii M.^{2,3(*)}

¹ Kyiv Academic University, 36 Academician Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv Ukraine

² G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv, Ukraine

³ Vasyl' Stus Donetsk National University, 21 600-richya Street, UA-21021 Vinnytsia, Ukraine

*Тел.: +38 044 424 1331 E-mail: belogolovskii@ukr.net

Four layered ternary transition-metal chalcogenides $MM'Te_4$ with $M = Nb, Ta$ and $M' = Ir, Rh$ belong to a new class of topological materials which are topological Weyl semimetals in their bulk form and display quantum spin Hall effect with sizable fundamental gaps in their monolayers. All four ternary compounds are known to be thermodynamically and dynamically stable. Their interlayer binding energies are slightly weaker than that of graphite, making them promising for experimental synthesis, mechanical exfoliation, and direct electronic characterization thereafter. These unique properties provide an ideal materials platform for exploring both fundamentals of topological phase transitions and novel device applications.

We have studied transport characteristics of $TaRhTe_4$ macroscopic structures. $TaRhTe_4$ is a typical van der Waals material, which consists of individual atomic-sized layers bound by weak van der Waals forces. Therefore, its transport properties are expected to be substantially anisotropic. These anticipations were controlled by measurements of the transport properties of macroscopic bulk samples cooled to 4.2 K. It was found that the resistance along the c axis was an order of magnitude greater than that in the ab plane. To determine the effect of the conduction anisotropy on the current and voltage distributions inside a sample, numerical finite element modeling was performed with COMSOL software package. For the first iteration of the model, we have chosen a simple 3D block with contacts represented by cylinders on top and bottom and assumed a diagonal conductivity tensor with the ratio of c to ab conductance as a fitting parameter. For an isotropic crystal, almost all current density lines are going through the center of the bulk, whereas it is not true for strongly anisotropic crystals. Calculations of the electrical voltage distributions and current density lines for different conductance anisotropies were in good agreement with $TaRhTe_4$ transport characteristics measured. The next activities are planned to reveal resistive switching effects in $TaRhTe_4$ nanostructure, as literature indicates the c -axis I - V hysteresis in transition-metal tellurides nanostructures. Additionally, theoretical investigation $TaRhTe_4$ predicts that it has both type-I and type-II Weyl nodes, which makes the material interesting from both phase engineering and topological perspective.

Currently, we started the nanostructure fabrication process. Mechanical exfoliation technique, that was originally used for graphene fabrication, was applied to macroscopic $TaRhTe_4$ samples. Crystal flakes transferred on Si/SiO_2 substrates by adhesive tapes were characterized by an optical microscope. The height profiles of selected flakes were obtained via atomic force microscopy. We were able to get $15 \times 15 \mu m$ flakes with 10-15 nm in thickness which allowed us to get enough contacts for a standard Hall-bar setup. Measuring and characterizing obtained structures are the next steps in our research.

K. Ochkan is deeply grateful to the Leibniz Institute for Solid State and Materials Research, Dresden, Germany where experimental research of the tellurides has been performed. This study was partly carried out within the Fundamental Research Programme funded by the Ministry of Education and Science of Ukraine (Project No. 0120U102059).

Вплив сили на висоту енергетичного бар'єру розриву карбінових ланцюжків і карбін-графенових нанoeлементів

**Петровська Д.Р.^{2,1(*)}, Котречко С.О.^{1,2}, Тимошевський А.М.¹,
Стеценко Н.М.¹**

¹*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, бульвар Академіка Вернадського, 36 03142, Київ, Україна.*

²*Київський Академічний Університет, бульвар Академіка Вернадського, 36 03142, Київ, Україна.*

**Тел.: +38 063 923 4461 E-mail: petrovska.d.r@gmail.com*

Карбін (лінійна форма вуглецю) та карбін-графенові нанoeлементи (графенові листи, що з'єднані між собою карбіновим ланцюжком) є перспективними матеріалами завдяки їх унікальним властивостям. У той же час, можливість практичного використання цих властивостей в наносистемах лімітується стабільністю і довговічністю цих об'єктів в умовах термомеханічного навантаження. На сьогодні робляться спроби адаптувати теорію Журкова для розв'язання цієї проблеми.

Мета роботи полягала у знаходженні аналітичних залежностей величини роботи розриву міжатомного зв'язку від рівня прикладеного силового поля.

У роботі розглянуто механізми розриву крайнього (для карбінових ланцюжків) і контактного (для карбін-графенових нанoeлементів) зв'язків. Проаналізовано класичний підхід Журкова, який ґрунтується на тому, що величина роботи розриву зв'язку є лінійною функцією прикладеного напруження, а коефіцієнт нахилу цієї залежності має сенс активаційного об'єму. За результатами DFT-розрахунків були отримані деформаційні залежності для окремих карбінових ланцюжків і карбін –графенових нанoeлементів. Спираючись на ці дані було обґрунтовано некоректність використання теорії Журкова для наноб'єктів, оскільки для них ці залежності є суттєво нелінійними.

Встановлено, що робота розриву міжатомних зв'язків у досліджуваних структурах досить точно описується залежністю Морзе, а деформаційна крива - похідною від цієї залежності. Це дозволило отримати аналітичний вираз для висоти енергетичного бар'єра в силовому полі для карбіну і карбін-графенових нанoeлементів.

Чутливість до деформацій і дефектів та їх комбінований вплив на електропровідність графену

Радченко Т.М.^{*}, Татаренко В.А.

Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,

бульвар Академіка Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна

**тел.: +380 44 424 9042; електронна адреса: tarad@imp.kiev.ua*

Як і для всіх кристалічних твердих тіл, наявність певної «кількості» безпорядку (дефектів) у графеновому шарі, — самого «тонкого» з наразі відомих матеріалів, що володіє унікальними електронними й механічними властивостями, — продиктовано другим законом термодинаміки. Дефекти відіграють роль безпорядку та завжди властиві графеновим зразкам із-за недосконалості процесу його виробництва. Імплементуючи квантово-механічний формалізм Кубо для чисельного розрахунку електропровідності, в роботі демонструється, що електронно-транспортні властивості графенового шару можуть бути «керованими» («регульованими») через комбінований вплив дефектів (точкових і лінійних розсіювачів носіїв заряду — електронів) і деформацій однобісного розтягання чи зсуву (рис. 1). Дефекти й деформації (напруження) зазвичай наявні в графеновому шарі в силу особливостей процедури його росту та коли його застосовують в наноелектронних «девайсах» (пристроях). Мотивувавшись двома експериментальними роботами [1, 2], де транспортної щільності не спостерігалось навіть за великих деформацій (22.5% розтягання і 16.7% зсуву), ми пояснюємо можливі причини, акцентуючи увагу на чутливості графену до деформацій і дефектів. Виявлена (обумовлена деформаціями та дефектами) електронно-діркова асиметрія й анізотропію провідності та немонотонність останньої як функції деформації може слугувати рушійним чинником на шляху функціоналізації (оптимізації) електронних і транспортних властивостей графену та інших 2D-матеріалів на його (й не лише) основі комбінування впливами дефектів і прикладених деформацій через їх тип, вміст («потужність») і конфігурації.

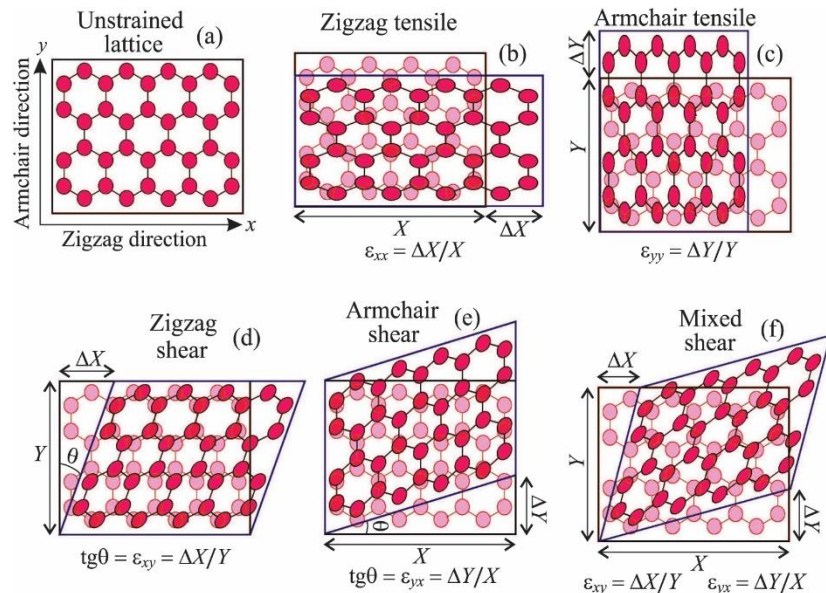


Рис. 1. Графенова гратниця (а), спотворена різними деформаціями: розтяганням вздовж напрямку типу «зигзаг» (b) або «крісло» (c), зсувом вздовж зигзагового (d), крісельного (e) чи обох (f) напрямків, де ϵ_{xx} , ϵ_{yy} , ϵ_{xy} і ϵ_{yx} — параметри тензора деформації.

1. X. He, L. Gao, N. Tang et al., *Appl. Phys. Lett.* **104**, 243108 (2014).
2. X. He, L. Gao, N. Tang et al., *Appl. Phys. Lett.* **105**, 083108 (2014).

Heat capacity features of PHTFE - SnO₂ nanocomposites

Rokytskyi M.O.(*), Sichkar T.H., Shut M.I.

National Pedagogical Dragomanov University, 9 Pyrogova St., 01601 Kyiv, Ukraine

**Тел.: +38 044 239 3076 E-mail: maksalrokitskiy@google.com*

It is widely recognized that the interfacial layer at the interface of the polymer - oxide nano-filler exerts the active effect of on the formation of properties of polymer nanocomposites, moreo-ver, even at low concentrations of the filler, major changes in the composite occur due to changes in the structure of the polymer in the interfacial and wall to the particles of the filler layers. While us-ing nanoscale particles as filler, a significant effect of filling is achieved with a low content of modi-fier. In this regard, the development of new nanocomposites based on oxide fillers is promising.

In terms of functional properties, nanocomposites based on highly stable and chemically re-sistant polar polymer polychlorotrifluoroethylene (PCTFE) and tin dioxide (SnO₂) are deserve spe-cial attention.

SnO₂ with a particle size of 40 - 150 nm and a typical tetragonal structure of crystallites and PCTFE with a particle size of 200 nm in a shape close to spherical were used for the composites preparation. In the process of the samples for the study preparation, a mixture of PCTFE and SnO₂ was carefully homogenized in a liquid acoustic medium. After heat treatment in the vacuum cabinet, the samples were pressed from the polymer melt under the same thermobaric conditions ($T = 513$ K, $p = 32$ MPa), which meet the technological conditions of processing PCTFE into products using a device that allows to reproduce the set conditions automatically.

Investigations of specific heat capacity temperature dependences of nanocomposites were conducted by the differential scanning calorimetry method using experimental facility DSC Q2000 produced by TA Instruments (USA) in 74 - 493 K temperature rate for different disperse fillers vol-ume content ($0 \leq \varphi \leq 54$ vol. %).

As a result of experimental studies of the temperature and concentration dependences of the specific heat of the composites, it was found that characteristic melting peaks of the matrix in the temperature range $\approx 443 \div 489$ K with the corresponding specific melting heat have been observed at graphical dependences.

Dependency analysis shows that, for small PCTFE concentrations of $0 \div 4$ %, the melting point varies slightly. A noticeable increase in the melting point of the matrix is observed for the con-centration range of $4 \div 12$ %, which corresponds to the achievement of the percolation threshold and its development. This is confirmed by the increase in system density associated with the devel-opment of the transition of an increasing volume of the matrix to the state of the wall layer. Howe-v-er, after a concentration of ≈ 12 %, the melting point decreases markedly (from ≈ 489 K to 479 K), which corresponds to the cessation of the increase of the system density in this concentration range despite the increase in the amount of denser filler in the volume less dense matrix.

In addition, maximums are observed in the temperature dependences of the specific heat ca-pacity in the temperature range $\approx 343 \div 443$ K. According to the results, these peaks belong to the properties of pure SnO₂, because they are observed on its calorimetric curve in pure form, and the brightness of their manifestation increases with increasing concentration of the filler.

Particular attention is drawn to the powerful decrease in the specific heat in the melting range, which is more clearly manifested as the concentration of the filler increases. Such a process can only be clearly observed in the presence of structural transformations with heat release.

Thus, the calorimetric studies of the non-composites of the PCTFE - SnO₂ system indicate that there are transformations in SnO₂ in the temperature range 343 - 443 K, which are accompanied by heat release in the melting zone and above, which leads to a significant drop in the specific heat.

**Нові композиційні матеріали на основі AlN для
мікрохвильової електроніки**

**Сербенюк Т.Б.^{1(*)}, Пріхна Т.О.¹, Свердун В.Б.¹, Свердун Н.В.¹,
Шаповалов А.П.², Олійник В.В.³, Григорук В.І.³, Загородній В.В.³,
Лаунець В.Л.³, Карпець М.В.¹, Полікарпова Л.О.¹**

¹*Інститут надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України, Автоза-водська 2,
04074, Київ, Україна*

²*Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова, Академіка Вернадського 36, 03142 Київ,
Україна,*

³*Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володи-мирська 64,
01033, Київ, Україна*

**Тел.: +38 044 430 1126 E-mail: serbenuk@ukr.net*

На основі порошків $\text{AlN-4\%Y}_2\text{O}_3\text{-(1-5)\%C}$ (алмаз) методом вільного спікання було отримано нові композиційні матеріали при однакових технологічних параметрах (часі змішування, температурі та тривалості спікання). Для дослідження структури та властивостей композитів було виготовлено зразки різної конфігурації, а їх щільність становила 3,14 – 3,16 г/см³.

Фазовий склад матеріалів досліджували використовуючи рентгенофазовий та рентгеноструктурний аналізи з використанням рентгенівського дифрактометра ДРОН-3 та методу Рітвельда. Дослідження структури проводили методом Оже-спектроскопії з високою роздільною здатністю за допомогою мікроаналізатора JAMP-9500F (фірма JEOL, Японія), а також за допомогою скануючої електронної мікроскопії (СЕМ). На векторному аналізаторі кіл Keysight Technologies PNA N5227A були проведені вимірювання основних величин електродинамічних характеристик розроблених керамік в діапазоні частот від 1 до 30 ГГц.

Для порівняння зміни електродинамічних характеристик розроблених композитів, в тому ж діапазоні частот було поміряно уявну і дійсну величини діелектричної проникності композиційного матеріалу на основі $\text{AlN-4\%Y}_2\text{O}_3$, без додавання порошку алмазу. Так, визначено, що значення діелектричної проникності (ϵ) становить 8-9, а тангенса кута діелектричних втрат ($\text{tg}\delta$) 0,03. При додаванні до даної суміші 1%С(алмазу) відмічено невелике зниження діелектричної проникності до 7,5-7, в той час як значення кута діелектричних втрат навпаки дещо зросло і становило 0,09. Причому, варто відмітити, що ϵ знижувалася лише на частотах від 1 до 10 ГГц з 7,5 до 7, і вже в частотному діапазоні 10-30 ГГц залишалася незмінною. Така сама тенденція до зниження значення ϵ на частотах від 1 до 10 ГГц спостерігалася і при вмісті 3% С(алмазу) у шихті. До того ж така кількість С у композиті призвела до суттєвого зменшення діелектричної проникності і її значення сягало 3,2, а $\text{tg}\delta=0,06$. Але вже при додаванні 5%С $\epsilon=9$, а $\text{tg}\delta=0,11$, що свідчить про здатність композитів до ефективного поглинання мікрохвильового випромінювання.

Аналіз структури матеріалів показав наявність основних фаз у композиті: hAlN , cAlN , $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ та наночастинок С, який представлений у вигляді карбону, що вірогідно утворився внаслідок графітизації алмазу під час спікання. Було встановлено взаємозв'язок між структурою матеріалів та їх властивостями і відмічено, що дійсна та уявна частини діелектричної проникності виміряні в діапазоні частот до 30 ГГц майже не змінюються у композитів, що мають однорідну структуру, тобто таку, у якій електропровідні включення наночастинок карбону розташовані у матричній фазі рівномірно. Таким чином, отримані значення характеристик, а також їх незмінність у вимірюваному частотному діапазоні свідчать про можливість використання розроблених керамік в області мікрохвильової електроніки.

Залежність електрофізичних властивостей від структури

композитів AlN-Y₂O₃-C-Mo

Сербенюк Т.Б.^{1(*)}, Пріхна Т.О.¹, Свєрдун В.Б.¹, Свєрдун Н.В.¹,
Шаповалов А.П.², Часник В.І.³, Карпець М.В.¹, Марченко А.А.¹,
Полікарпова Л.О.¹

¹Інститут надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України, Автоза-водська 2,
04074, Київ, Україна,

²Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова, Академіка Вернадського 36, 03142, Київ,
Україна,

³Державне підприємство науково-дослідний Інститут «Оріон», Е. Потьє 8-а, 03057,
Київ, Україна, *Тел.: +38 044 430 1126 E-mail: serbenuk@ukr.net

В умовах вільного спікання було розроблено нові композиційні матеріали на основі порошків AlN-4%Y₂O₃-5%C(порошок алмазу)-5%Mo та досліджено вплив процесу отримання даних матеріалів на формування їх структури та функціональні властивості. Лінійний розрахунок показав високу щільність композитів, яка становила близько 3,16 г/см³.

За допомогою дифрактометра ДРОН-3 було проведено рентгенофазові та рентгеноструктурні дослідження, результати яких оброблено методом Рітвельда. Структуру розроблених композитів досліджували методами СЕМ та Оже-спектроскопії з високою роздільною здатністю на мікроаналізаторі JAMP-9500F (фірма JEOL, Японія). Були проведені вимірювання електричного опору зразків матеріалів при напрузі $U = 50$ В за допомогою чотирьохзондового методу з нанесенням срібних контактів на зразки та вимірювання затухання мікрохвильового випромінювання в діапазоні частот 34–36 ГГц на приладі Р2-65.

Дослідження фазового складу показали, що композити на основі AlN-Y₂O₃-C-Mo представлені у вигляді основних фаз hAlN, C, Y₃Al₅O₁₂, MoB і Al₂O₃. В результаті структурних досліджень цих матеріалів за допомогою СЕМ було відмічено, що вірогідно під час спікання відбувся процес графітизації алмазу, оскільки вміст карбону виявлено в невеликих кількостях в зернах AlN, хоча в основному фаза C представлена окремими нановключеннями. Саме за рахунок рівномірного розподілу електропровідних зерен у структурі композиту забезпечуються поглинаючі властивості матеріалу.

Внаслідок вимірювання електричного опору зразків композитів було встановлено, що всі розроблені матеріали є чистими діелектриками, оскільки питомий електричний опір зразків знаходиться в межах $1 \cdot 10^{11}$ - $1,25 \cdot 10^{11}$ Ом·см.

Визначення електрофізичних властивостей матеріалів, зокрема затухання електромагнітного випромінювання на частотах 34-36 ГГц, дало змогу встановити взаємозв'язок між технологічним процесом виготовлення композитів, особливостями їх структуроутворення та властивостями. Так, показано, що внаслідок підвищення часу розмелу та змішування шихти з 3 до 6 хв. відбувається формування гомогенної структури композитів, що суттєво впливає і на їх поглинаючу здатність, оскільки значення затухання електромагнітного випромінювання зростає від 7,1 до 13,2 дБ. Але при розмелі шихти, протягом 9хв. затухання дещо падає і становить 13,0 дБ, що вірогідно пов'язано з розподілом зерен карбону у структурі композиту.

З отриманих результатів видно, що всі розроблені матеріали мають високі діелектричні властивості та високі значення затухання мікрохвильового випромінювання, а оптимальними параметрами виготовлення нових щільних композиційних матеріалів на основі AlN є процес при якому змішування та розмел шихти відбувається протягом 6 хв.

Хімічна модифікація поверхні полістиролових наноплівкок

Шинкаренко О.В., Бекетов Г.В., Ліптуга А.І.

Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України, Київ, пр. Науки 41, Україна

Тел.: +38 044 525 9798 E-mail: o.v.shynkarenko@gmail.com

Поверхня полістиролу широко використовується в імуноферментному аналізі (ІФА, англ. enzyme-linked immuno sorbent assay, ELISA) для визначення наявності певних антигенів та діагностики різноманітних інфекційних захворювань, шляхом реакції антиген-антитіло. ІФА широко використовується в науково-дослідній роботі та клінічній лабораторній діагностиці.

Чутливість та динамічний діапазон вимірювань методом ІФА залежить від сорбційної ємності поверхні полістиролу. Світові виробники мікротитрувальних плашок для ІФА не розголошують способи активації поверхні полістиролу для збільшення сорбційної ємності.

Дана робота присвячена опису екологічно безпечного, малозатратного та нетрудоємкого методу хімічної модифікації наноплівкок полістиролу для підвищення їх адсорбційної здатності.

Власна технологія гідрофілізації сприятиме конкурентоспроможності місцевих виробників продуктів, для досліджень методом ІФА та сприятиме зменшенню собівартості таких досліджень.

Різні типи хімічних зв'язків, що беруть участь при адсорбції біомолекул на поверхні полістиролу зображені на рис.1.

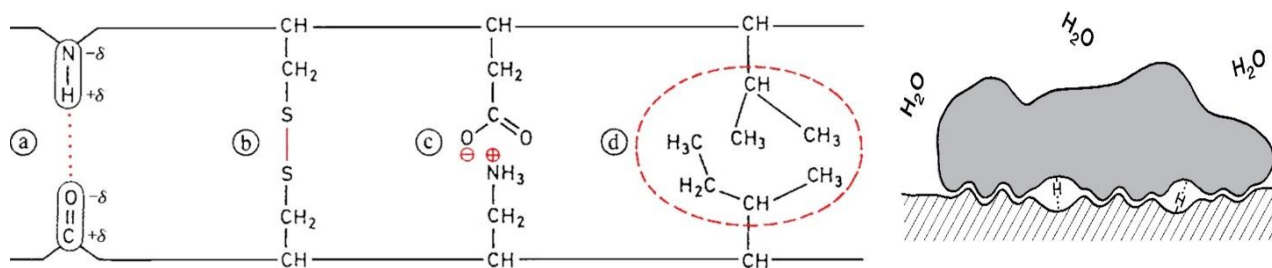


Рис. 1. Типи хімічних зв'язків, що беруть участь при адсорбції до поверхні полістиролу. Ван-дер-Ваальсовські зв'язки: (а) - водневий зв'язок між двома диполями; (d) - зв'язок полярностей що чергуються між вуглеводневими залишками; "Істинні" хімічні зв'язки: (b) -ковалентний дисульфідний зв'язок; (c) - іонний зв'язок між іоном карбоксилу та аміно-іоном, (e) - комбінована дія водневих сил та зв'язків змінних полярностей між вуглеводневими залишками [1].

Наведено результати досліджень поверхонь гідрофілізованого полістиролу за допомогою FTIR-спектроскопії, скануючої зондової мікроскопії, вимірювання контактного кута та адсорбційних властивостей для вибраних класів біомолекул. Обговорюються можливі механізми гідрофілізації на основі характерних реакцій фенільного ядра та утворення на поверхні полістиролу полярних функціональних груп.

1. Principles in Adsorption to Polystyrene / Peter Esser. // Application note. – 2014. - Thermo Fisher Scientific Inc. - <https://assets.thermofisher.com/TFS-Assets/LSG/Application-Notes/D19>

Особливості технологічних, фізико-механічних і функціональних властивостей нано-дисперсних реакційно-спечених нікелевих сплавів

Солнцев В.П., Назаренко В.А., Солнцева Т.О.,

Васильківська М.А., Луговський Ю.Ф., Бродніковський М.П.

Інститут проблем матеріалознавства НАН України ім.І.М.Францевича

вул. Кржижановського,3, Київ, 03142, Україна

Тел.: +380508003845 E-mail: SolntcevVP@gmail.com

Розроблено нову технологію отримання дисперсно-зміцнених сплавів, основою якої є реакційне спікання. На відміну від традиційної технології на основі механохімічного синтезу, яка застосовується в світі з моменту створення дисперсно-зміцнених сплавів, технологія реакційного спікання дозволяє отримувати матеріали високої втомної міцності і технологічної пластичності, а також і підвищити інші функціональні та фізико-механічні властивості [1]. Саме при реакційному спіканні ліквідуються ефекти спадковості структури порошкового тіла в зв'язку з високою швидкістю росту температури при реакційній взаємодії і відповідно високою швидкістю кристалізації [2], що є наслідком незворотних процесів при реакційній взаємодії компонентів [3]. Як виявилось, найбільшу технологічну пластичність мають загартовані сплави на основі гранично легованих твердих розчинів при температурах близьких до температури солідусу. Утворення тріщин в них не відбувалося при ступенях обтиску до 80%.

Прояви високої технологічної пластичності ймовірно пов'язано з ефектом деформаційного старіння. Проведений РФА сплавів на всіх стадіях технологічних операцій показав, що після спікання при охолодженні зразків у печі структура сплавів представлена твердим розчином на основі нікелю.

При холодному прокатуванні загартованих заготовок сплавів з алюмінієм у кількості, відповідній границі розчинності його в твердому розчині при температурі солідусу, матеріал зазнає деформаційного старіння, що приводить до виділення текстурованого інтерметаліду. Розпад твердого розчину і виділення великої кількості інтерметаліду супроводжується екзотермічним ефектом. Це призводить до сплеску температури і підвищенню пластичності сплаву, що і спостерігається.

Важливу роль виконує і нанодисперсний оксид ітрію. Зважаючи на велику щільність дислокацій біля його наночастинок, ініціюються процеси розпаду пересиченого твердого розчину, і спостерігається релаксація накопиченої вільної енергії. При прокатуванні рівноважних твердих розчинів цього не відбувається. При цьому введення до 1,5% оксиду ітрію підвищує температуру після деформаційної рекристалізації до 0,8 $T_{пл.}$ і більше.

Межа витривалості таких матеріалів на базі випробувань $N = 10^7$ циклів становить не менше, ніж 0,6-0,7 межі текучості, що значно перевищує необхідну величину 0,4.

1.V.Solntsev V., G.Frolov, L.Kravchuk, V.Nazarenko, I.Bilan, K.Petrash, I.Husarova, F.Potapov, International scientific journal "Machines. Technologies material", Sofia, 2017 – p. 254-257.

2. В.П. Солнцев, В.В. Скороход, К.Н. Петраш, Т.А. Солнцева, Сборник научных трудов «Адгезия расплавов и пайка материалов», вып.47. – Киев. – 2014. – С. 25-34.

3. В.П. Солнцев, В.В. Скороход, Т.А. Солнцева, Порошковая металлургия, № 3/4 2010.- №3/4.- С. 22 - 291.

Фізика міцності і довговічності карбін графенових нанoeлементів
С. Котречко^{1,2}, А. Тимошевський¹, Є. Колівоско³, Н. Стеценко^{1(*)}, Ю. Матвійчук¹
¹Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
Київ-03680, бульв. Академіка Вернадського, 36, Україна
²Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
Київ-01601, вул. Володимирська, 64/13, Україна
*Тел.: +38 050 311 1137 E-mail: natusjaimp@gmail.com

Особливість сучасного стану розвитку нанофізики і нанотехнології полягає у переході від першого етапу, який полягав у пошуку наноструктур з унікальними властивостями та розроблення технологій їх отримання, до другого етапу, основною метою якого є практичне використання цих властивостей у нанoeлементів і нановиробах. На цьому етапі на перший план виходить їх довговічність (ресурс) в умовах експлуатації у виробі. Основними факторами, які обмежують ресурс є підвищені температури, дія силових, електричних та магнітних полів.

Мета доповіді полягає у аналізі основних фізичних ефектів, які контролюють процес втрати стабільності і розриву зв'язків в окремих ланцюжках карбіну та карбін - графенових нанoeлементів, що складаються з листів графену, з'єднаних ланцюжками карбіну. В цілому, ці ефекти притаманні нанoeлементам і наноконструктам, що складаються із одно- двовимірних наноструктур.

Спираючись на результати першопринципних (DFT) розрахунків, моделювання методом молекулярної динаміки та статистичного аналізу, були віднайдені основні чинники, які контролюють довговічність досліджуваних об'єктів, а саме:

- Поява «зони нестабільності» (IZ) в процесі деформації карбінового ланцюжка, чи карбін-графенового нанoeлемента (КГН). Довговічність нанoeлемента суттєвим чином залежить від параметрів IZ. Якщо величина діючої сили перевищує рівень нижньої границі IZ (сила «падає» в IZ) - спостерігається синергізм впливу на довговічність силового поля і температури. В результаті цього довговічність нанoeлементів може зменшуватися на десятки порядків. В доповіді розглядається модель цього явища і дається прогноз термосилових умов появи синергізму.
- Квантомеханічні ефекти, які можна класифікувати, як «прямі» (безпосередні) і «непрямі». До прямих ефектів відноситься вплив енергії нульових коливань на імовірність розриву контактних зв'язків в КГН. До непрямих квантомеханічних ефектів належить залежність величини довговічності від того, парним, чи непарним є кількість атомів в карбіновому ланцюжку («even-odd» ефект). Цей ефект є результатом існування «even-odd» ефекту для енергії розриву і міцності контактного зв'язку. Крім того, спостерігається інверсія цього ефекту під дією механічного навантаження.

В доповіді розглядається запропонована авторами флуктуаційна модель втрати стабільності і довговічності КГН, яка дозволяє прогнозувати їх ресурс (в широкому інтервалі значень термомеханічного навантаження).

В рамках запропонованого підходу віднайдено області температур і значень величини механічного навантаження, де можливе практичне використання КГН.

1. Mikhailovskij I., Sadanov E., Kotrechko S., Ksenofontov V., and Mazilova T. *Phys. Rev. B* (2013) **87** : 045410 (9). DOI: 10.1103/PhysRevB.87.045410
2. Timoshevskii A., Kotrechko S., and Matviychuk Yu. *Phys. Rev. B* (2015) **91** : 245434 (9). DOI: 10.1103/PhysRevB.91.245434
3. Kotrechko S., Timoshevskii A., Kolyvoshko E., Matviychuk Yu., and Stetsenko N. *Nanoscale Research Letters* (2017) **12** : 327. <https://doi.org/10.1186/s11671-017-2099-4>
4. S. Kotrechko, A. Timoshevskii, E. Kolyvoshko, Yu. Matviychuk, N. Stetsenko and B. Zhang, *Eur. Phys. J. Plus* (2019) **134** : 182. DOI 10.1140/epjp/i2019-12611-5

Про інверсію знаку деформації в шарах In
Раранський М.Д., Олійнич-Лисюк А.В., Курек І.Г.,
Ташук Р.Ю^(*), Ташук О.Ю.

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського, 2, 58012 Чернівці, Україна*

**Тел.: +38 0955074333 E-mail: tashchuk.roman@chnu.edu.ua*

При дослідженні термомеханічної деформації в тонких шарах In під час термоциклювання в інтервалі 2÷300 К була виявлена низькотемпературна (при 80 - 100 К) інверсія знаку сумарної дилатації шару ε_{ii} , та подвійна інверсія знаку деформації, у напрямку, перпендикулярному до площини шару ε_{zz} [1], що при різкій зміні температури і обмеженні процесів релаксації напружень в шарі може стати причиною його руйнування [2]. Метою нашого дослідження стало виявлення природи інверсії знаку ε_{ij} тонких шарів індію при термоциклюванні. Коротко основні результати дослідження можна звести до наступного:

- Диференційований аналіз кривих температурно-силової дії росту температури на тонкі шари In показав, що при постійних напруженнях ~ 1 МПа в ауксетичних напрямках домінують термічні напруження ε_T , а в неауксетичних напрямках і термічна, і механічна ε_m складові стають одного порядку величини, при цьому деформації у площині шару займають проміжне між ауксетичними і неауксетичними напрямками значення.

- Температурні залежності ε_m в неауксетичних і ауксетичних напрямках у шарі змінюються по-різному: лінійно зменшуються з ростом T у першому випадку і нелінійно ростуть – у другому, причому точка зміни $\frac{d\varepsilon_m}{dT}$ в обох випадках рівна 80К (температура інверсії ε_{ii}) (рис.1).

-

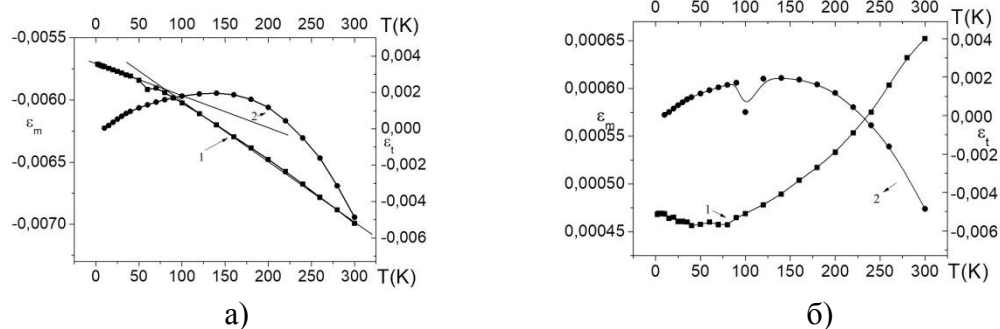


Рис.1. Температурні залежності механічної (1) ε_m і термічної (2) ε_T складових деформації в неауксетичному (а) і ауксетичному (б) напрямку в шарі індію.

- подвійна інверсія знаку ε_{zz} деформацій зумовлена в основному характером температурної залежності термопружних деформацій, які визначаються особливостями фононного спектру індію.

1 Raransky M.D., Tashchuk R.Yu., Kurek I.G., Oliynich-Lysyuk A.V. Thermoplastic Properties of Quasi-Isotropic Indium Layers//Abstractbook XVII International Freik Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems.Ivano-Frankivsk, May 20-25, 2019. – P. 257.

2. Cheng X., Liu C. And Silberschmidt V.V. Numerical analysis of thermo-mechanical behavior of indium micro-joint at cryogenic temperatures. Computational Materials Science.- 2012.- 52 (1).-PP. 274 – 281.

Nanoporous carbon materials for high power supercapacitors

S.O. Zelinskyi*, N.G. Stryzhakova, O.V. Gozhenko, A.Y. Maletin, Y.A. Maletin

Institute for Sorption and Problems of Endoecology NAS,

13 General Naumov Str., Kyiv 03164 Ukraine

** Corresponding author; phone: +38 093 7025188;*

e-mail: S.O.Zelinskyi@nas.gov.ua

Structural and chemical methods for modification of nanoporous carbons have been developed to best match their electrochemical characteristics with key requirements for high power super-capacitors. Microwave treatment has mostly been employed for more efficient and less expensive processing that yielded the best adaptation of pore size distribution to organic electrolyte and enabled modifying the carbon surface with N-heteroatoms. Microwave treatment has been optimized taking into consideration the Maxwell-Wagner effect that can reduce the surface accessible for the electrolyte and, hence, reduce the capacitance [1, 2]. The bell-shaped curve in Fig. 1 illustrates the optimization process when the excess of microwave treatment deteriorates the result.

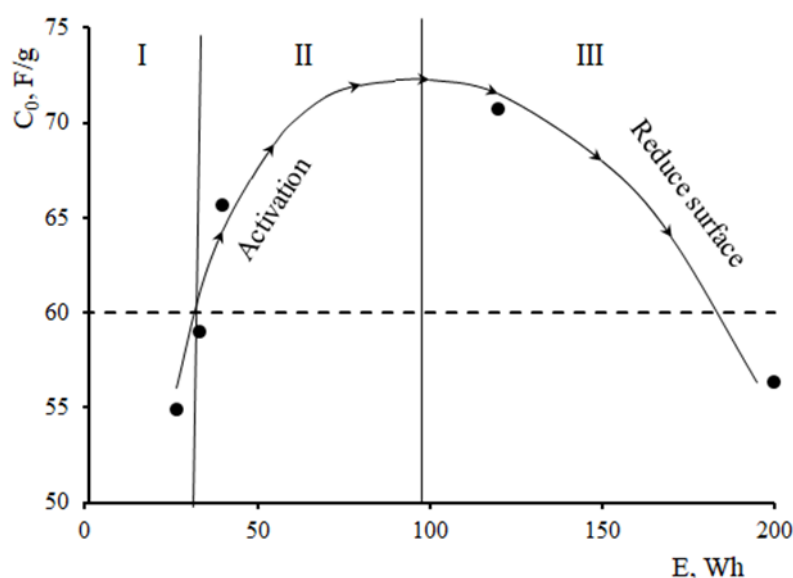


Fig. 1. Electrode capacitance vs. energy of microwave treatment of carbon impregnated with water. Dashed line corresponds to the capacitance of initial carbon; area I corresponds to Maxwell-Wagner effect resulting in surface reduction; area II corresponds to activation process that increases the surface; area III corresponds to Maxwell-Wagner effect again after all the water has evaporated from the pores.

Supercapacitor prototypes based on the improved electrodes and optimized electrochemical cell design have been developed and manufactured in partnership with Yunasko-Ukraine LLC. Pilot batches of both single cells with the capacitance from 200F to 3000F and modules of 12V, 48V and 90V have been assembled, and their test results verify the highest power density worldwide. The 90V/13F modules were successfully tested in Denmark for blade pitch control in wind turbines. The 48V/165F modules can be used as a power supply in hybrid buses.

1. K. Teawon, L. Jaegun, L. Kun-Hong, Carbon Lett., 15, No. 1: 15 (2014) DOI: <https://doi.org/10.5714/CL.2014.15.1.015>.

2. L. Zhang, M. Mi, B. Li. et. al., Res. J. Appl. Sci. Eng. Technol., 5, No. 5: 1836 (2013) DOI: <https://doi.org/10.19026/rjaset.5.4946>.

Самоорганізація мікроструктури при пластичній деформації в нанокристалах металів з ГЦК та ОЦК ґраткою

Гаценко О.С.^{*}, Засимчук О.Е., Турчак Т.В., Баскова О.І.

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

^{}E-mail: gats@imp.kiev.ua*

Відомий факт, що далеко від термодинамічної рівноваги можливі процеси утворення структури (самоорганізація) системи в енергетичному полі [1]. Тобто, цікавим є саме фізичний механізм самоорганізації структури кристалічного матеріалу, що призводить до його пластичної формозміни. Ми змогли показати, що за деяких умов може виникати упорядкована структура, що складається з вакансій. Така структура призводить до появи в мікрооб'ємах, так званих атом-вакансійних станів. Останні, в свою чергу, є зародками гідродинамічних каналів, по яких відбувається локалізована в об'ємі в'язко-пластична течія речовини. Нами було розглянуто варіант самоорганізації деформованого кристала, та показана можливість гідродинамічної формозміни кристалічного матеріалу без участі дислокацій та інших дефектів кристалічної будови за умов, коли система знаходиться далеко від термодинамічної рівноваги [2].

Аналітичних розрахунки та комп'ютерне моделювання підтвердили можливість утворення каналів в'язкопластичної течії речовини в бездислокаційних нанокристалах з ГЦК та ОЦК кристалічною ґраткою, що знаходяться в механічному полі. Показано, що атоми, що коливаються в ланцюжках, розташованих в ділянках концентрації напруг, можуть створювати вакансії, що призводить до утворення впорядкованої структури, яка складається з вакансійних дефектів. Така структура може розглядатися як зародки каналів в'язкопластичної (гідродинамічної) (ГК) течії речовини, яка призводить до локалізованої в них пластичної формозміни. Моделювання проводили методом молекулярної динаміки з використанням ґрід – технології.

1. Г. Николис, И. Пригожин, *Самоорганизация в неравновесных системах* (Москва: Мир: 1979)
2. Е. Засимчук, О. Баскова, О. Гаценко, Т. Турчак J. Mater. Eng. Performance, **27**, 8 (2018) ss.4183-4196. <https://doi.org/10.1007/s11665-018-3515-3>

Hydrodynamic plastic flow in metal materials

Zasimchuk E.^{1(*)}, Turchak T.¹, Chaurov N.²

¹*G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, National Academy of Sciences of Ukraine,
Kiev, Ukraine*

²*National University of Life and Environmental Sciences of Ukraine*

**Tel.: +38 066 2408461 E-mail: eezas@imp.kiev.ua*

The band structures (microbands and shearbands) were first discovered and attracted attention of researchers in connection with plastic flow localization and absence of dislocations sliding signs during deformation. Experimental investigations of structure formations during plastic deformation conducted in subsequent 70 years did not make clear the nature of these bands. Nevertheless the study of structure formation in various metals and alloys at different means of deformation revealed the bands to arise in chaotic ensemble of dislocations after destruction of previous cell structure, to become on all zoom levels and to localize the deformation. Taking into account the plastic deformation to pass far from thermodynamic equilibrium we proposed the synergetic model of these structures formation in metallic crystals.

Deformation structure formation in single-crystals and polycrystalline metals and alloys was examined. It was shown the formation of structure in metallic materials during plastic deformation to be realized in two scenarios: 1) Relaxation structure formation — formation of the cellular and polygonal structure, recrystallization. It helps to reduce internal stresses, but does not play an active role in the deformation process. 2) Self-organization of a deformed crystal - synergistic structure formation.

It was shown that with sudden changes in the external mechanical field (impulsive load) in conditions distant from equilibrium (plastic deformation), a significant softening of the material and an increase in plasticity are observed. This is due to the formation of MBs and SBs, despite the increase in external stress. The study of the internal structure of MBs and SBs showed the localization of vacancy defects in them. It was concluded that the localization of plastic mass transfer in the bands is due to the creation of a liquid-like amorphous structure, which supports the hydrodynamic flow of crystalline material in them. The possibility of channel formation in metals with using analytical calculations and computer simulation [1, and others] is considered and proved. Based on these results, it was concluded that dislocation slip is not the only possible mechanism of plastic deformation of crystalline materials, and plastic form change in an external mechanical field may take place without the participation of dislocations. The main reason for this is that plastic deformation occurs far from thermodynamic equilibrium, where the laws of nonlinear physics work.

1. E. Zasimchuk, O. Baskova, O. Gatsenko, and T. Turchak, J. Mater. Eng. Performance, 27, 8 (2018) pp.4183-4196. <https://doi.org/10.1007/s11665-018-3515-3>

**Моделювання поведінки тіла з псевдо-пружно-пластичного матеріалу
при нестационарному навантаженні**

Стеблянюк П.О.¹, Дьомічев К.Е.^{2(*)}, Петров О.Д.³

¹ *Університет митної справи та фінансів,
м. Дніпро, вул. В. Вернадського, 2/4 Україна*

² *Київський міжнародний університет, м. Київ, вул. Львівська, 49, Україна*

**Тел.: +380 44 594 03 04 E-mail: info@kymu.edu.ua*

³ *Дніпровський національний університет ім. О. Гончара,
м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72, Україна*

Сучасні деталі і елементи машинобудівних та інших конструкцій і пристроїв виготовляються з матеріалів, які мають властивість пам'яті форми і поведуть себе псевдо-пружно-пластично. В процесі виготовлення вони можуть отримувати великі пластичні деформації, перебувати під впливом складного нестационарного силового і температурного навантаження. До складних процесів деформування може призводити і їх нерівномірний нагрів у поєднанні з силовими чинниками. Для моделювання та дослідження поведінки таких елементів конструкцій потрібно визначати нестационарний термомеханічний стан не тільки на псевдо-пружній стадії деформування, а й за межею пружності. Існуючі чисельні методи розв'язання таких нестационарних задач призводять, як правило, до значних обчислювальних труднощів і не завжди бувають ефективні. Тому розробка методів розв'язання нестационарних задач термомеханіки для просторових тіл з пам'яттю форми та псевдо-пружно-пластичністю є актуальною задачею.

Авторами запропоновано нову феноменологічну модель для опису властивостей матеріалів з пам'яттю форми при значних деформаціях [1, 2]. В моделі враховується тепло, яке виділяється в процесі фазових переходів в матеріальних точках тіла. Це дозволило описати ряд експериментальних даних на різних зразках при різних температурах і умовах навантаження, отримати необхідні константи запропонованої феноменологічної моделі. Проведено експериментальне обґрунтування запропонованої моделі поведінки матеріалу з пам'яттю форм. На випадок деформування термо-псевдо-пружно-пластичного матеріалу узагальнено фізичні співвідношення теорії пластичності (теорії течії з кінематичним і трансляційним зміцненням), що дозволило застосовувати розроблену феноменологічну модель при розв'язанні задач термомеханіки на континуальному рівні.

Розроблено новий варіант ефективного методу розв'язання нестационарних просторових задач термомеханіки у випадку деформування термо-псевдо-пружно-пластичного матеріалу, який засновано на використанні ідеї розщеплення повної системи рівнянь за геометричними властивостями. Застосування для апроксимації невідомих функцій та їх похідних по координатах двовимірних напружених сплайнів. Такий підхід дозволив підвищити до четвертого порядку (на два порядки) точність апроксимації методу і дає можливість обирати більшу за розмірами сітку по координатах в порівнянні з кінцево-різницевою методом за умови досягнення однакової точності обчислень. Наведені числові результати дослідження поведінку сплаву Ni-Ti, який характеризується пам'яттю форми.

1. Petrov, Yu. Chernyakov, P. Steblyanko, K. Demichev, V. Haydurov, Eastern-European Journal of Enterprise Technologies, No. 4/7 (94): 25 (2018). DOI: 10.15587/1729-4061.2018.131644
2. P. Steblyanko, Y. Chernyakov, A. Petrov, V. Loboda, Theoretical, Applied and Experimental Mechanics, No8: 205 (Springer Verlag: 2019)

**Peculiarities of electronic structure and positron spectroscopy of
magnetic binary alloys**

E. G. Len^{1,2}, **V. V. Lizunov**¹, **T. D. Shatnii**¹, **M. V. Ushakov**¹, **T. S. Len**³, **E. A. Tsapko**¹

¹*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv, Ukraine*

²*Kyiv Academic University, NAS and MES of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine*

³*National Aviation University, 1 Kosmonavt Komarov Ave., 03058 Kyiv, Ukraine*

E-mail: len@imp.kiev.ua

A substantial contribution of the interaction energy between electrons as compared with their kinetic energy exhibits as the strong correlations in electrons motion through crystal lattice, which determines the unique physical properties of strongly correlated systems. There are two major problems in the theory of such systems: the correlations are often nonlocal in time and/or in space. In the present work, we consider the case of absolute zero of temperature, which makes it possible to use a static approximation, and we use the cluster method to describe the spatial nonlocality of correlations. Our approach [1] is convenient because it can be extended to magnetic alloys with strong electron correlations and with arbitrary degrees of short and long atomic and magnetic ordering. Moreover, the possibility of adequate analysis of both the ordering behaviour and the different electron correlations' effects in binary substitution alloys determined mainly by changes in electronic structure allows to apply this approach for interpretation of data of such powerful experimental method as positron spectroscopy, which also are sensitive to the peculiarities of the electronic structure. Thus, the method of angular correlation of annihilation radiation requires integration over the angles the electron spectral function depended on the vector of electron quasi-momentum. As determined in the present work, the maximal antiferromagnetic order can lead to the appearance of a not full gap in total density of electronic states, but a quasi-gap due to the overlapping of different impurity bands. The electron scattering processes on clusters of two or more lattice sites form peculiarities on the density of states and lead to redistribution of charge and spin densities between atoms of different types. At equal concentrations of binary alloy components, such redistribution can provide the different magnetic moments on ions of different types, which leads to different splitting of impurity bands into Hubbard sub-bands and to breaking of symmetry of both the electronic density of states and the magnetic phase diagram of binary alloys. At low concentrations of one of the alloy's components and at values of electron concentration far from half-filling, a Coulomb splitting can be appear for sub-band of main component only. Under these conditions, the atoms of main component of alloy have the magnetic moments, but the impurity atoms can be nonmagnetic even with similar characteristics of chemical elements formed the alloy. Therefore, it is possible to observe the effect of switching-off the magnetism of such magnetic atoms in alloys due to charge and spin densities redistributions.

Вплив ефектів багатократності розсіяння випромінення на формування фазоконтрастних зображень некристалічних об'єктів

**Лізунов В. В.^{1(*)}, Молодкін В. Б.¹, Владімірова Т. П.¹, Решетник О. В.¹, Василик Я. В.¹,
Куліш М. П.², Дмитренко О. П.², Павленко О. Л.²**

¹*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, бульв. Академіка
Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна*

²*Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 60,
01033 Київ, Україна*

**Тел.: +38 044 422 9563 E-mail: lizunov.vyacheslav@gmail.com*

Розвиток неруйнівних методів діагностики некристалічних об'єктів є надзвичайно важливим для цілого ряду галузей. Наряду із традиційними медичними застосуваннями ці методи починають використовуватись в ядерній енергетиці, зокрема, для характеристики стану стінок реакторів. При цьому широко застосовується тривісний спосіб з використанням кристалу-аналізатора, який дозволяє одержувати високороздільні зображення для об'єктів мікрометрового розміру при відносно простій апаратурній схемі.

В даній роботі шляхом врахування ефектів багатократності розсіяння випромінення визначений вплив як параметрів самого об'єкта, так і інструментальних факторів схеми.

Шляхом моделювання одержано профілі інтенсивності модельних некристалічних об'єктів при різних умовах проведення експерименту. Зокрема, розрахунки було проведено для випромінення різних довжин хвиль у різній геометрії дифракції та для цілого набору відстаней між некристалічним об'єктом та кристалом-аналізатором.

Продемонстровано, що зміна відстані між некристалічним об'єктом і кристалом-аналізатором може суттєво змінити форму профілів інтенсивності, отже, зміщуючи кристал-аналізатор відносно об'єкта можна цілеспрямовано змінювати форму профілю інтенсивності та, в результаті, покращувати контрастність зображень. Ще одним параметром, зміною якого можна керувати проявом у зображенні характеристик некристалічного об'єкту, є довжина хвилі випромінення. Так, використання “жорсткого” та “м'якого” рентгенівського випромінення дозволяє одержати відмінні профілі інтенсивності одного і того ж некристалічного об'єкту.

Також додатково було показано, що наявність дефектів у кристалах, що формують дану рентгенооптичну схему, сильно змінює форму їхніх кривих відбивання. Неврахування наявності дефектної структури та її неоднорідності в монокристалах монохроматора і аналізатора може призвести до невірного визначення характеристик досліджуваного некристалічного об'єкту.

Отже, показано, що задачу визначення характеристик некристалічного об'єкту може бути розв'язано шляхом використання фазоваріаційного підходу, який полягає в тому, що для вирішення вказаної задачі виконуються варіації фази шляхом перебору комбінацій різних умов експерименту (довжини хвилі випромінення, вибору геометрії дифракції та рефлексів і т.п.).

**Зміни електронного стану поверхні монокристалу W (110) після
термічної та йонної обробок**

**Васильєв М. О., Лень Є. Г., Макеєва І. М.*, Колесник В. М.,
Шевченко М.Я., Смольник С. В.**

*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36, 03142, Київ, Україна*

**Тел.: +38 044 422 9575 E-mail: mak0506@ukr.net*

На сьогодні високоструміві та високопотужні прямі перетворювачі теплової енергії в електричну можуть бути створені лише на основі високотемпературних термоємисійних перетворювачів енергії (ТЕП) з електродами з тугоплавких металів. Оскільки електроди для таких ТЕП працюють в екстремальних умовах високих температур (> 2000 K), це обумовлює ряд технічних труднощів, пов'язаних, наприклад, з інтенсивним випаровуванням матеріалу катоду. Одним із способів боротьби з погіршенням технічних характеристик ТЕП через випаровування матеріалу є використання катоду і аноду однакового хімічного складу, але з різною роботою виходу електронів з їх поверхонь. Домогтися цього можна виготовляючи катод і анод для ТЕП з монокристалів одного й того самого тугоплавкого металу, але з різною орієнтацією їх робочих поверхонь відносно кристалографічних площин. У зв'язку з цим, безумовно, є актуальним вивчення властивостей по-різному орієнтованих поверхонь монокристалів тугоплавких металів, у тому числі вольфраму, і впливу фізико-хімічних і технологічних обробок зразків на роботу виходу електронів з їх певним чином орієнтованих поверхонь.

Дослідження електронних станів поблизу орієнтованої паралельно кристалографічній площині (110) поверхні монокристала W після її послідовних різного виду термічних та йонної обробок виконано за допомогою методу плазмонної спектроскопії. Всі вимірювання виконані за допомогою надвисоковакуумного низькоенергетичного електронного спектрометра, що обладнаний чотирьохсітковим напівсферичним енергоаналізатором, а також електронною та йонною гарматами [1]. Робочий тиск залишкових газів в камері становив не гірше $1,0 \cdot 10^{-7}$ Па. Для виділення піків у спектрі вторинних електронів використано метод одноразового диференціювання кривої затримки вторинного струму шляхом реєстрації сигналу першої гармоніки струму колектора при модуляції затримувального потенціалу синусоїдальною напругою [2].

Визначено усереднені за енергією первинних електронів значення енергії поверхневих (E_s) і об'ємних (E_b) плазмонів, їх відношення E_b/E_s , концентрації електронів провідності, що відповідають цим плазмонам, відносну зміну міжплощинних відстаней, а також значення роботи виходу електронів з поверхні зразка W (110) у вихідному стані та після послідовних нагрівань в інтервалі температур 500–1750°C, експозицій в чистому атомарному кисні і бомбардування низькоенергетичними йонами Ag^+ . Дано пояснення як суттєвої залежності експериментальних значень енергії збудження плазмонів від стану поверхні зразка, так і причин наближення цих значень в процесі термохімічної та йонної обробок до значень, розрахованих згідно з класичною теорією колективних електронно-плазмових коливань в твердому тілі. Одержано важливі для практичного застосування в термоємисійних перетворювачах енергії мінімальне (4,33 eV) і максимальне (4,46 eV) значення роботи виходу електронів з поверхні W (110), що визначаються типами її обробки. Проведено порівняння з аналогічними даними, раніше одержаними для поверхні W (100).

1. M. A. Vasil'ev and S. D. Gorodetsky, *Vacuum*, **37**: 723 (1987). DOI: 10.1016/0042-207X(87)90261-2
2. V. A. Tinkov, M. A. Vasylyev, and G. G. Galstyan, *Vacuum*, **85**: 677 (2011). DOI: 10.1016/j.vacuum.2010.10.008

Diagnostics of structural defects and electronic properties of carbon nanotubes by positron annihilation

E. A. Tsapko, I. Ye. Galstian (*)

*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine. stenforti@ukr.net*

A specific feature of nanomaterials' structure is that each of their components, in addition to the atomic structure, has a specific local structure of free volumes. Moreover, we can study their defects and electronic structure exactly within the frame of positron spectroscopy (PS) [1]. The interest in such objects is primarily because they do not have exact analogues in three-dimensional systems and that a number of phenomena that have wide prospects of application characterizes them. In particular such as high electron mobility in carbon nanotubes, effective absorption of microwave and infrared radiation, etc. The defects' influence on the parameters of multi-walled carbon nanotubes' (MWCNTs) electronic structure is established via method of angular correlation of annihilation radiation (ACAR). Analysis of the results shows that annihilation occurs with both π -electrons (in the interlayer intervals), quasi-free electrons, and electrons of covalent unsaturated bonds. As determined, the increase in the defects concentration results to an increase in the radius of localization of the electron wave function (r_{m1}) in the interlayer intervals and to an increase in the quasi-free electrons concentration. Due to the formation of edge dislocations in the MWCNTs, the doubling of r_{m1} (up to 0.25 nm), the hybridization of unsaturated and stretched σ -bonds and, as a consequence, the increase of the concentration of conduction electrons occur.

We can establish as follows. The average value of the parameter that is determining the wall thickness of the nanotube is $r_{mb} = 0.0535$ nm; this parameter changes in the range $0.0493 \leq r_{mb} \leq 0.0680$ nm. The values of the parameter r_{mb} above the average are observed in a narrow range of probabilities of positrons annihilation with almost free electrons P_{θ_F} in CNTs near the characteristic value of 13.7%. The average value of the parameter determining the interlayer distance of the nanotube is $r_{mi} = 0.132$ nm; it changes within the range $0.1204 \leq r_{mi} \leq 0.2175$ nm. In the studied set of strongly defective samples with the largest values of r_{mi} and P_{θ_F} , an increase of r_{mi} is observed with an increase of P_{θ_F} . Corresponding to the Fermi momentum values of the parameter (angle) θ_F of the ACAR form are in the range $7.293 \leq \theta_F \leq 10.311$ mrad. The probabilities of annihilation of positrons with almost free electrons P_{θ_F} in CNTs are within $6.63\% \leq P_{\theta_F} \leq 37.58\%$.

The high sensitivity of positrons' annihilation to defects can be used to develop methods for certification of MWCNTs and identification of defects, *i.e.* obtained from ACAR values of $2r_{mb}$, $2r_{mi}$, and R are the layer thickness, the interlayer distance, and the effective radius of the free volume of MWCNTs, respectively. The unique informativeness of PS, which provides the simultaneous characterisation the defects and electronic structure taking into account their mutual influence, opens up wide possibilities for using this method in the processes of studying new nanomaterials and expanding the scope of their technical application.

1. M. M. Nishchenko, E. A. Tsapko, Yu. V. Lisunova, G. P. Prikhod'ko, and N. I. Danilenko, *Inorganic Materials: Applied Research*, 2, No. 2: 186 (2011).
<https://doi.org/10.1134/S2075113311020158>

Формування комплексу вимог до методик оцінки роботоздатності зварних з'єднань «основний-наплавлений метал» нікелевих жароміцних сплавів типу ЖС6 та ЖС32, що імітують відновлення кромки лопаток авіаційних ГТД в промислових умовах

Ющенко К.А., Яровицин О.В.^(*), Звягінцева Г.В., Черв'яков М.О., Волосатов І.Р., Олійник Ю.В.

ІЕЗ ім. Є.О. Патона НАН України, Київ, вул. К. Малевича 11, Україна

**Тел.: +38 0442052156 E-mail: yarovytsyn@ukr.net*

В процесі мікроплазмового порошкового наплавлення (МПН) формується особливий тип структури наплавленого металу важкозварюваних нікелевих жароміцних сплавів (НЖС) типу ЖС6 та ЖС32, що зокрема відрізняється від аналогічного литого подрібненням дендритної структури, зменшенням розміру карбідних часток та більш рівномірним їх розподілом. Багаточисельні металографічні дослідження, проведені ІЕЗ ім. Є.О. Патона, ДП «Івченко-Прогрес», АТ «Мотор-Січ» для відповідних зварних з'єднань сплаву ЖС32 з об'ємом наплавленого металу до 2 см³, показали відсутність схильності до утворення тріщин на усіх етапах ремонтної технології. Роботоздатність таких зварних з'єднань сплаву ЖС32 в умовах тривалої експлуатації відновлених робочих лопаток при 950-1100°C багатократно перевірена на практиці.

Важливою складовою на етапі довиробничої підготовки ремонтної технології на базі процесу МПН є проведення порівняльних атестаційних випробувань механічних властивостей (короткочасна та тривала міцність) відповідних зварних з'єднань в обсягах, еквівалентних вимогам технічних умов (ТУ) на литий НЖС. Відповідні зварні заготовки для наступної вирізки зразків для механічних випробувань виготовляються багат шаровим наплавленням. Проте збільшення його об'єму понад 2-5 см³ для НЖС типу ЖС6 і ЖС32 супроводжується значним підвищенням схильності до утворення тріщин. Для з'ясування причин їх утворення виконано комплексні дослідження мікроструктури зазначених зварних з'єднань «основний-наплавлений метал» (растрова електронна мікроскопія) та оцінку показників їх короткочасної та тривалої міцності при T=1000°C.

Встановлено, що короткочасні механічні властивості наплавленого металу ЖС6 та ЖС32 після штатної термічної обробки сплаву (зокрема гомогенізації) характеризуються переходом від підвищених показників границі міцності $\sigma_B \approx 1200$ МПа і достатньо високих показників відносного подовження ($\epsilon \approx 12-15\%$) при 20°C до малопластичного стану при 1000°C з $\epsilon \approx 1.1-2.1\%$ та показниками $\sigma_{0.2}$ або σ_B на рівні 0.90-0.95 порівняно з литим НЖС. Відповідний показник пластичності при 1000°C для литого сплаву ЖС6У складає 5.5%, а для литого сплаву ЖС32 – 17.6%. При обмеженні температури термічної обробки (1050°C – 2.5 год.) наплавленого металу його ϵ при 1000°C зменшується разом зі зниженням σ_B у 1.2-1.4 рази: для сплаву ЖС6У – $\epsilon \approx 0.45\%$; для сплаву ЖС32 – $\epsilon \approx 0.1\%$. Показано, що малопластичний стан наплавленого металу ЖС32 при температурі 1000°C визначає рівень механічних характеристик досліджуваного зварного з'єднання в цілому (високотемпературна статична та тривала міцність).

Пропонується до комплексу атестаційних випробувань механічних властивостей зварних з'єднань НЖС з вмістом зміцнюючої γ' -фази більше 50 об. % включити високотемпературні випробування на статичну міцність наплавленого металу, які не передбачені в ТУ на литий сплав. Це дозволить як виявляти порушення технологічної міцності, або малопластичний стан їх локальних зон до проведення більш затратних та складних випробувань (тривала міцність, мало- та багато циклова втома, швидкість росту втомної тріщини), так і надалі більш адекватно інтерпретувати їх результати.

Investigation of the process precipitation of Fe-Co layered double hydroxides

Frolova L.A.

Ukrainian State University of Chemical Technology, Ukraine

Тел.: +38 032 46-63-51 E-mail: 19kozak83@gmail.com

Currently, much attention is paid to the development of technologies for producing electrochemical capacitors due to the possibility of their use in electric and hybrid electric vehicles. Spinel ferrites can mainly be used to charge storage. The dispersion of the product obtained is very important. Ferrites of different morphologies have different surface areas of the material, which leads to different values of supercapacity. Thus, the exclusion of the high-temperature stage through the use of coprecipitation methods leads to the formation of highly dispersed and, accordingly, high-capacity materials.

Researchers are developing new technologies and improving existing technologies for producing spinel ferrites [1, 2]. The use of liquid-phase production technologies allows you to change the structure, composition and, as a result, the functional properties of ferrites.

The experiments showed the possibility of the formation of homogeneous precipitates of layered double hydroxides (LDH) of various compositions Al-Mg LDH, Al-Zn LDH, Al-Ca LDH. The formation of ferrite prestructures in Mn-Cu or Co-Ni-Zn-hydroxide systems has been the subject of many studies. The possibility of forming compounds of uniform composition was explained by close pH values of the precipitation of the corresponding hydroxides. Usually, the hydrophase method involves the coprecipitation of trivalent and divalent hydroxides with subsequent heat treatment at high temperatures. However, the process of coprecipitation of iron (II) and cobalt (II) hydroxides has been studied insufficiently.

In this work, using the methods of thermodynamic analysis, potentiometric titration, residual concentrations, cyclic voltamperometry (CVA), we studied the Fe^{2+} - Co^{2+} - SO_4^{2-} - H_2O system and established the sequential stages of the formation of polyhydrocoscomplexes.

As follows from the data obtained, in the presence of both iron (II) and cobalt (II) cations in the solution, the peak area CVA is similar to the individual solutions Fe^{2+} - SO_4^{2-} - H_2O and Co^{2+} - SO_4^{2-} - H_2O . In addition, peaks corresponding to the redox processes of the destruction of cobalt (II) and iron (II) polyhydroxycomplexes are present in the joint graph at the ratio $[\text{OH}^-]/[\text{M}^{2+}] = 1$ in the cathode and anode curves. A gradual increase in peaks and a slight shift in the cathode peak towards positive values can be explained by the formation of more stable intermediate complexes in comparison with individual iron compounds.

It should also be noted that the forward and backward paths of the CVA cathode curves do not coincide, which indicates a significant effect of the gradual release of cations from the formed polyhydrocoscomplexes.

Since the cobalt atom has a smaller radius than the iron atom, the Co-O bond energy is greater, therefore, in accordance with the Kossel scheme, the main properties decrease in the series $\text{Fe}(\text{OH})_2$ - $\text{Co}(\text{OH})_2$ and the stability of the complexes increases, which is associated with filling electrons of d-orbitals with low energy in an octahedral environment with ligands.

- 1 B. Bhamini, M. Tan, A.S. Shanmugam, Study of mixed ternary transition metal ferrites as potential electrodes for supercapacitor applications, *Results in Physics*, 7, 2017, 345-353.
- 2 V. Venkatachalam, R. Jayavel, Novel synthesis of Ni-ferrite (NiFe_2O_4) electrode material for supercapacitor applications, *AIP Conference Proceedings*, 1665, No 1, AIP Publishing LLC, 20

«Biopolymer batteries»- a new concept for environment friendly & safer energy storage

Moklyak V.V., Hrubiak A.B.^(*), Ostafyichuk B.K., Chelyadyn V.L.

G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,

36 Academician Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv, Ukraine

*Tel.: +38 068 057 2434 E-mail: hrubiak0andrii@gmail.com

Every year, contentment of the growing needs of modern electronics and electrical engineering requires the development of energy-efficient technological solutions and the activation of complex scientific research in the field of creating new functional cathode materials for high-capacity portable lithium-ion power sources (LPS). We propose to use the nanocomposites «3D-C-template / 3D-biopolymer» as the new type cathode material. This will be solve a number of problems related to electrostatic transport, structural transformations, energy-efficient performance LPS «Biopolymer Batteries». «3D-C-template / 3D-biopolymer» is potentially attractive to create a conceptually new type of environmentally friendly high-energy LPS. It was predetermined by advanced 3D hierarchy of structure, availability of free positions for adsorption of electrolyte ions, relative electrochemical stability and satisfactory electrostatic conductivity of the proposed composites.

LPS «Biopolymer Batteries» formed on the basis of the cathode «3D-C-template / 3D-biopolymer». Li foil used as anode. Current density in galvanostatic discharge mode for LPS was 10 A/kg. LPS discharge curve presented in Fig.1. The specific discharge capacity is 1275 Ah/kg at discharge in the voltage range 4.5–1.5 V. There is a sharp decrease in voltage up to 1.8 V with a slight accumulation of capacity. The discharge curve changes the slope from a potential of 1.8 V. There is a horizontal plateau and accumulation of considerable capacity. After that, there is a rapid decline in capacity. The specific energy of the LPS discharge is 2180 Wh/kg.

Testing of LPS in potentiodynamic mode (Fig.1, inset) demonstrates predictably good cycling of «Biopolymer Batteries» in the voltage range of 4.5-1.5 V with Coulomb efficiency $Q_{eff} = C_{discharge} / C_{charge} = 98\%$. The loss of the cycle capacity after 100 cycles is not more than 10%. The predicted current mechanism involves the flow of electrochemical reactions and the course of surface adsorption / desorption processes of lithium cations on the highly developed lateral surface of the bulk biopolymer chain with the participation of lateral radicals of the main polymeric framework and localization of Li ions on the carboxyl C-terminal groups of the polymer links.

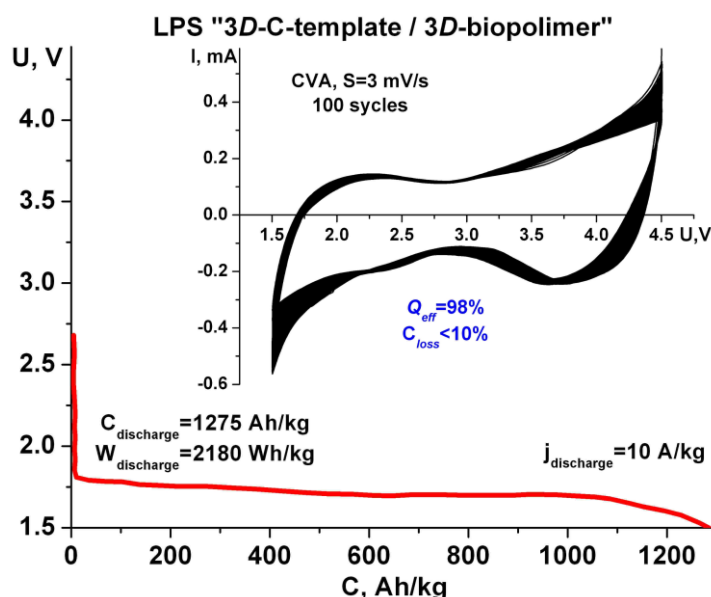


Fig.1 – LPS discharge curve of composite cathode type «3D-C-template / 3D-biopolymer» (on insertion of CVA-diagram of cycling of this LPS in the range of 1.5-4.5 V for 100 cycles)

to the question of the constructive solution of the ballast water management system based on the DI NU «OMA»

Ivanov O.V.^{1(*)}, Voronkov E.O.¹, Kiose D.F.¹, Tiron-Vorobiova N.B.^{1()}**

Danube Institute of National University "OMA", 68600, Fanagorijaska st. 9, Izmail, Ukraine

**Phone: +38 04841 611 66 E-mail: dinuoma@onma.edu.ua*

*** Tiron-Vorobiova N.B – Ph.D., Associate Professor of the Department of General Sciences of DI NU «OMA»*

Today, the global crisis has acutely affected all economic sectors. This also applies to the global Maritime industry and global shipping. Now everyone is hearing the same expression everywhere - "infection". Infection crisis, loss-making crisis. Based on the severe danger of the level of infection for all of the humanity, we analyzed the global market for related ballast water treatment systems, (hereinafter BWTS – Ballast Water Treatment System) of the largest shipping companies, world shipyards. Referring to the IMO Convention - according to which the strict requirements of D-2 are spelled out, today, more than 70,000 thousand vessels are in the field of equipment/re-equipment with BWTS data (fully meeting IMO requirements). The market of BWTS is huge (it is called the "ballast water treatment market"). It is known that ballast acts as a "balance" - to maintain bank and stability of ships. However, on the other side, it is an accumulated mass of all kinds of living marine organisms. Which, moving in the open ocean space, accumulate in themselves foreign materials, modify, accumulate inside ballast tanks and are dumped into the ocean, causing enormous damage to marine life. World leaders in the development of the BWTS address this issue in every possible way, analyzing global dangers and creating the latest BWTS. These are the largest companies - Optimarin, Alfa Laval, Team Tec Ocean Saver AS, Sunrui, Ecochlor, and Erma First, each of which supplies IMO-compliant BMSs to the global market. Nevertheless, the world does not stand still. Today, the requirement is D-2 (the quantitative and dimensional ratio of alien invasive inclusions that are in sea (ballast) water: microorganisms-destructors, pathogenic bacteria, viruses), and over time, they will be tightened to D-3 [1].

In connection with the global environmental crisis for today, we, the scientific staff of DI NU "OMA" (represented by the leader of our project: Danylyan A.G.^{1st}), created an experimental model of a BWTS that meets the requirements D-2 of the IMO Convention. The priority of our BWTS is multifunctional, conciseness and an innovative solution; The main structural units are Lev Yutkin's electro-hydraulic shock unit and a nanofilter with carbon inserts, which ensures the maximum screening of invasive foreign species residing in ballast water. We have obtained a patent for a method for cleaning and disinfecting ballast water at the Ukrainian Institute of Intellectual Property, we are waiting for the approval of a patent for an invention, which should be evaluated by a qualified world commission by appropriate experts. The credo of our project is scalability. Development (production) of the proposed BWTS at the global level, adhering to the principle of national scientific unity. We have concluded an agreement with a shipyard known in the Odessa region for the development of a large-scale project - for the use, installation and research of BWTS on large-capacity vessels. Without being indifferent, paying attention to the worldwide infection with COVID-19, we proposed BWTS in connection with the constructive solution of the nanofilter (porous carbon tubes that trap "nano" particles; according to the IMO Convention, the dimension ratio is less than 10 microns). It can be also used as treatment facilities of large enterprises, business sectors that prepare water resources exclusively for consumer needs.

1. Маслов І.З., Данилян А.Г. Тірон-Воробйова Н.Б. та ін. Установа для очистки балластних вод / Науково-практичний журнал «Екологічні науки», Державна екологічна академія післядипломної освіти та управління Міністерства екології та природних ресурсів України, м. Київ, 2019, стор. 104-108. DOI: 10.32846/2306-9716-2019-2-25-16

Testing of fuel catalyst «Fuel Well» onboard

Shumeiko M.S.^{1(*)}, Sharkevych M.S.¹, Ryabokon V.I.¹, Danylyan A.G.^{1()}**

*Danube Institute of the National University "Odessa Maritime Academy", 68600, Fanagorijska st. 9, Izmail, Ukraine, *Phone: +38 04841 611 66 E-mail: dinuoma@onma.edu.ua*

***Danylyan A.G. – Senior Lecturer of DI NU «OMA», 1st category engineer*

The marine diesel engine emits exhaust gases consisting of such combustion products as nitrogen oxides (NO_x), carbon monoxides (CO_x), dioxide and sulfur (SO_x), and others [1]. Having researched the modern methods and technologies of emission reductions, engineers and scientists of the Danube Institute of NU "OMA" have started research work with the use of the fuel catalyst (products "Eco-Auto-Titan Ukraine") [2].

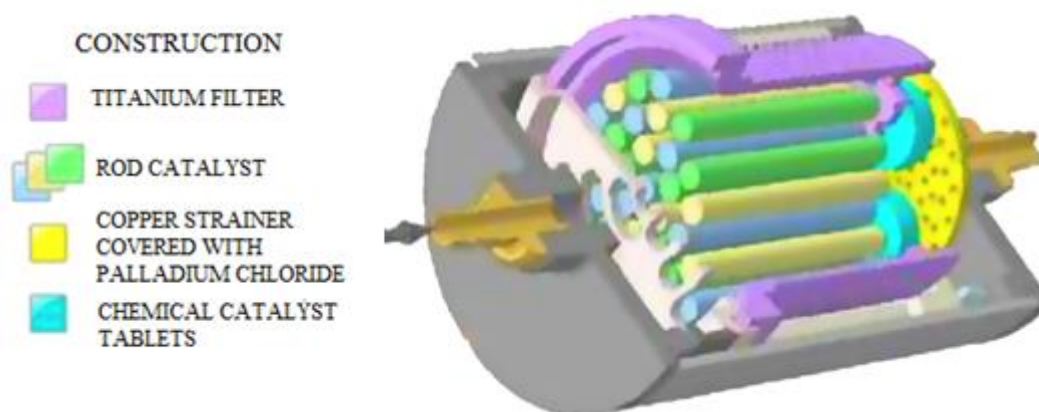


Fig. 1 Construction of the fuel catalyst «Fuel Well»

The catalyst has three chambers in which the processing of hydrocarbon fuels takes place in order to optimize its state to achieve better and more intense combustion in the chambers of internal combustion engines.

The first chamber is precipitated by heavy fractions that have entered the fuel, as well as selective purification of diesel fuel from sulfur compounds.

In the second chamber, the fuel is catalytically treated by contacting its hydrocarbon molecules with the active surface of the granular catalyst, which comprises metal compounds and catalytically active organic inclusions. After that, the fuel is treated at the molecular level by additives tablets, salts of metals, which settle on the surface of the details of the cylinder piston group.

In the third chamber, through the use of titanium activator glasses, the modified fuel is further activated and stabilized. The effect of catalytic treatment of the fuel persists for 30-40 seconds, which is enough to burn it in the combustion chamber of the engine [2].

There were a number of tests of the catalyst «Fuel Well» on the existing «UDSC» vessels M/V «Portovy», M/V «Kobzev», M/V «Senilov» and on the seiner in the Indian Ocean («Shivaganga» company), where fuel economy was 17.5%, and the smoke of exhaust gases reduced by 50% [2,3].

Integrated fuel treatment increases combustion completeness, thereby reducing fuel consumption and exhaust emissions into the atmosphere of harmful substances.

1. Семанов Г.Н. Вредные выбросы в атмосферу с судов на пути к стандартам ИМО. – СПб.: Изд-во Наука и транспорт. Морской и речной транспорт, 2013 – С. 45-47.
2. Программа испытаний Преобразователя судового топлива на т/х «Портовый-22», «Кобзев», «Shivaganga» – Измаил: Изд-во Дунайский институт НУ «ОМА», 2016. – 8с.
3. Материалы заседания рабочей группы Дунайской комиссии по техническим вопросам Испытание катализатора Fuel Well КТ – 6Д на речных судах с целью снижения вредных выбросов в выхлопных газах двигателей (18-21 октября) – 2016 Будапешт. С-12.

Defining optimization approaches to the process of deep utilization of marine diesel heat

Kulahin E.O.¹, Skorobrekha I.I.¹, Maslova D.I.¹ Naydyonov A.I.*

Danube Institute of the National University "Odessa Maritime Academy», 68600, Odessa region, Izmail, Fanagoryis`ka St., 9, Ukraine

**Tel.: +38 067 204 5196 E-mail: shandalzaar@gmail.com*

***Naydyonov A.I. – Senior Lecturer of DI NU «OMA»*

At present, energy efficiency is increasingly in demand. This is due to the significant rise in energy costs and the increased concern for the environment. The working scheme of deep utilization of low-temperature heat offered by us, with its own versatility, is able to satisfy all navigational modes of the ship in different latitudes of the oceans.

The main engine of the ship has the exhaust gases after a gas turbine supercharging with parameters of 320-3400 C in the rated power mode, transferring them to a combined steam boiler, which runs autonomously on the fuel, and as a propellant, operating from the exhaust gases of the main engine. The steam in the boiler is supplied to the ship's distributor. All ship consumers have varying degrees of thermal use of steam with parameters 260–2800 C. The largest consumer of heat on board is the steam heater of heavy fuel storage tanks, whose viscosity is at 500 C 380 mm² / sec.

The proposed thermal scheme allows you to work in any latitude. A system is provided for the operation of the liquefied petroleum gas (LPG) from the internal circuit of the engine, having previously closed the collection of the exhaust steam and started consuming the coolant from the main engine in its nominal mode of operation. The coolant in this mode is the water of the internal cooling circuit of the engine with parameters 85-950 C [1]. Due to the versatility of the scheme, it is possible to use a ship-based auxiliary boiler with autonomous combustion to maintain the desired temperature in the cooling circuit of the main engine for efficient operation of the HSTS (hydro-steam turbine set) [2]. Using the thermostatic valve, you can raise and lower the internal circuit cooling temperature of the main engine.

When operating in medium temperate climates, the return of the steam-water mixture will be 130–1150 C, which can be successfully used in the HSTS. In the northern latitudes, in the conditions of increasing steam consumption and the need to maintain the heat balance of the entire thermal circuit in the proposed scheme, it will be enough to open the valve of the distributor and to pass more heat to the heat exchanger through the remote control valve. This will at the same time increase the temperature on the condenser and the boiler warm box, which will increase the temperature of the auxiliary combined boiler and the entire thermal circuit [2]. This operating mode can be used with the boiler's autonomous combustion system.

In order to maximize the use of low-temperature heat, we suggest mounting in a fuel storage tank a heat column with a high degree of heat capture inside. It will only heat up to the right amount of fuel used by the main engine and diesel generators. Other fuel in the storage tank will be heated to a lower temperature.

1. A. V. Volyncev, A. N. Sobolenko. Utilizaciya teplovyh resursov glavnogo sudovogo dvigatelya posredstvom ispol'zovaniya teplonasosnoj ustanovki [Vestnik GUMRF], No. 5 (39), p. 144–150 (2016) (in Russian).

2. A.G. Danilyan, V.I. Chimshir, I.V. Vlasov, A.I. Najdenov. Novye napravleniya glubokoj utilizacii tepla sudovyh dizelej [Visny`k Odes`kogo nacional`nogo mors`kogo universy`tetu], No. 3 (49), p. 91–103 (2016) (in Russian).

Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України

Україна, 03142, Київ бульвар Академіка Вернадського, 36

Телефон:

Дирекція: + (380) 44 424-10-05

Учений секретар: + (380) 44 424-31-10

Факс: + (380) 44 424-25-61

Email: metall@imp.kiev.ua

Організаційний комітет

Бевз В.П. (голова), Галстян І.Є. (секретар), Михайлова Г.Ю. (підтримка сайту), Татаренко В.А., Кочелаб Є.В., Ленъ Є.Г., Лізунов В.В., Кондауров О.В., Мокляк С.В., Радченко Т.М., Рудь М.О., Філатова В.С.

Телефон: + (380) 44 424-13-31

Секретар: + (380) 93 254-20-10

Email: fmie_2019@imp.kiev.ua

Сайт конференції: <https://www.fmie.space/>