IV Всеукраїнська конференція молодих вчених

СУЧАСНЕ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО. МАТЕРІАЛИ ТА ТЕХНОЛОГІЇ. СММТ-2023

ЗБІРНИК ТЕЗ

Інститут металофізики
ім. Г. В. Курдюмова
НАН України

5-6 жовтня 2023

Київ, Україна

У збірці представлено тези доповідей учасників IV Всеукраїнської конференції «Сучасне матеріалознавство. Матеріали та технології. СММТ-2023». 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 та конструкційних матеріалів.

Для фахівців у галузі фізики, матеріалознавства, електрохімії, електроніки та наноелектромеханіки; може бути корисною викладачам, аспірантам і студентам за спеціальністю «прикладна фізика та наноматеріали», «матеріалознавство», «наноматеріали та нанотехнології», представникам державних і комерційних компаній, орієнтованих на сучасні технології отримання та дослідження функціональних матеріалів, а також перспективи їх застосування.

ТЕМАТИКА КОНФЕРЕНЦІЇ СММТ-2023

- Наноматеріали та нанотехнології
- Конструкційні та функціональні матеріали
- Біоматеріали та біонанотехнології
- Методи дослідження матеріалів
- Технології синтезу та модифікування матеріалів
- Інформаційні технології у матеріалознавстві
- Міждисциплінарні аспекти матеріалознавства

ЗМІСТ

(номер доповіді відповідає номеру сторінки)

1. **Кордюк О.А.** Квантові матеріали, технології, проєкти в Україні і світі (огляд)

НАНОМАТЕРІАЛИ ТА НАНОТЕХНОЛОГІЇ

2. Korostil A.M., Shaternik A.V. Energy efficient electric field-induced precessional switching of tunnel magnetic nanostructure
3. Петришин В.В., Столярчук Н.В., Томіна В.В., Мельник І.В. Видалення аніонів Cr(VI) з водних розчинів функціоналізованими полісилоксановими матеріалами
4. Gerasimchuk V.S., Gerasimchuk I.V., Dromov V.V. Nonlinear localized waves and their stability near a combined linear and nonlinear metasurface
5. Leonov D.S., Boboshko Ye.M., Lytvyn R.V., Kolesnichenko A.A., Sezonenko A.Yu., Minitska N.V., Romashkina M.A., Lukianenko I.V., Byba Ie.G., Yamshynskyi M. M., Pysarevskyi B.Yu., Barabash M.Yu. Photosensitive Materials for Ordered Nanoobjects Based on Templates
6. Menesenko D., Shapovalov A., Belogolovskii M., Aliev A., Parra A. Resistive studies of doped indium-tin oxide superconducting films
7. Pedan R., Makushko P., Dubikovskyi O., Bodnaruk A., Burmak A., Makarov D., Vladymyrskyi I. Thermally-induced evolution of structural and magnetic properties of Pt/Co bilayer stacks
8. Джежеря Ю.І., Полинчук П.Ю., Герасимчук І.В., Кравець А.Ф. Керування намагніченістю комірки пам’яті комбінованим імпульсом локальних магнітних полів
9. Петренко Є. В., Блудова Л. В., Колесніченко Ю.А., Шитов М. В., Рогацький К., Соловйов А. Л. Аналіз флуктуаційної провідності ПЛІВОК $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ у сильних магнітних полях
10. Солдатенко О.М., Філатов О.В. Срібні нанострижні як основа моно-компонентного матеріалу з прецизійними властивостями
11. Варварін М. О., Ніцук Ю. А. Оптичні властивості наночастинок оксиду цинку, одержаних методом колоїдного синтезу
12. Фея О.Д. Нові низькоенергетичні метастабільні стани дихалькогенідів TiX_2(X=S, Se, Te) з хвилями зарядової густини, отримані за допомогою еволюційних розрахунків
13. Михайлова Г.Ю., Якимчук М.М., Шевченко М.Я., Лень Є.Г. Особливості створення полімер-дефектних ВНТ матеріалів
14. Мандрика А.Г., Пасенко О.О., Осокін Є.С., Верещак В.Г. Енергетичні ефекти утворення кластерів ортосилікатної та метансульфонової кислоти у водному розчині

КОНСТРУКЦІЙНІ ТА ФУНКЦІОНАЛЬНІ МАТЕРІАЛИ

15. Погребова І.С., Янцевич К.В. Фізико-хімічні умови процесу дифузійного хромосиліціювання вуглецевих сталей в середовищі хлору
16. Borynskyi V.Yu., Polishchuk D.M., Savina Yu.O., Pashchenko V.O., Kravets A.F., Tovstolytkin A.I., Korenivski V. Temperature-controlled magnetization reversal in nanoscale synthetic antiferromagnetic disks
17. Дехтяренко В.А. Прядко Т.В. Нові матеріали для зберігання водню на основі евтектичних сплавів системи Ti-Zr-Mn-V-Ni
18. Дехтяренко В.А., Бошко О.І., Загорулько І.В. Сплав на основі кобальту (сплав типу ХТН) для створення захисного покриття на титані від дії водневого середовища.

19. Дехтяренко В.А. Сплав $Ti_{15,5}Zr_{30}Mn_{38}V_{5,5}Cr_{5,5}Co_{5,5}$ на основі фази Лавеса типу С14 для сорбції водню
20. Дехтяренко В.А. Нові композитні матеріали на основі інтерметаліду типу AB_2 з магнієм для зберігання водню
21. Гаценко О.С., Мордюк Б.М., Турчак Т.В., Баскова О.І., Кушнарьова О.С. Аналіз впливу ультразвукової ударної обробки на структуру і механічні властивості алюмінієвих сплавів.
22. Єрьоменко О.В., Граніцький Ю.Є.*, Томіна А.-М.В. Дослідження впливу мікросфер на абразивну зносостійкість надвисокомолекулярного поліетилену
23. Горбатенко Ю.В., Кривчіков О.І., Романцова О.О., Королюк О.О. Уніфі-кований аналіз температурних залежностей теплопровідності впорядкова-них та розупорядкованих твердих тіл
24. Каширіна Я.О., Муратов О.С., Казіміров В.П., Роїк О.С. Особливості формування локального атомного впорядкування у бінарних Co – Sn розплавах
25. Кривенко К. В., Палагеча Д. Л., Богомол Ю.І. Керамічні композити спрямовано армовані високоентропійними диборидами
26. Yana Sychikova, Sergii Kovachov, Anatoli I. Popov Chemical Deposition Techniques for Synthesizing High-Quality CdS/ZnS Heterostructures
27. Sukhenko I.V. Claim of discovery of a room-temperature superconductivity in copper-substituted lead apatite: a review
28. Єрьоменко О.В., Томін С.В., Єрьоміна К.А. Дослідження впливу тигельного графіту на показник абразивного стирання надвисокомолеку-лярного поліетилену
29. Єфіменко М.Ю., Чернета З.Є., Богомол Ю.І. Деградація сплаву ti6al4v при повторному використанні в процеці 3Д-друку

БІОМАТЕРІАЛИ ТА БІОНАНОТЕХНОЛОГІЇ

30. Мартиненко І.О., Каленюк О.А. Шаповалов А.П. Ефект наведеної надпровідності сплавом MoRe у Ni.

МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ МАТЕРІАЛІВ

31. Безгуба В.В., Плющай О.І., Кордюк О.А. Новий метод експериментального дослідження електронної структури матеріалів: FeSuMa
32. Бурлаков В.О., Полоцький Д. Ю., Короташ І. В., Руденко Е. М.,

    Філатов О.В. Вимірювання коефіцієнту теплопровідності плівки AlN методом 3ω

ТЕХНОЛОГІЇ СИНТЕЗУ ТА МОДИФІКУВАННЯ МАТЕРІАЛІВ

33. Sergii Kovachov, Yana Sychikova, Anatoli I. Popov Electrochemical Etching of p-type GaAs: Microscale Oxidation Mechanisms
34. Смольнік С.В., Шевченко М.Я., Галстян І.Є., Михайлова Г.Ю., Лень Є.Г. Відбиття повільних електронів від поверхні граней (110) та (100) вольфраму при адсорбції цезію
35. Сухенко І.В., Карбівський В.Л. Модифікація електронної структури кальцієвих апатитів шляхом ізоморфних заміщень
36. Заіка В.В., Швачко Н.К., Карбівський ВЛ. Радіочастотне нанесення наноструктурованих тонких плівок цинк оксиду

37. Золотаренко Ол.Д., Золотаренко Ан.Д., Аханова Н.Е., Уалханова М., Щур Д.В., Габдуллін М.Т., Тарасенко Ю.О., Рудакова О.П., Золотаренко О.Д., Чимбай М.В., Загорулько І.В. Одержання ендофуллеренів заліза

38. Золотаренко Ол.Д., Золотаренко Ан.Д., Аханова Н.Е., Уалханова М., Щур Д.В., Габдуллін М.Т., Тарасенко Ю.О., Рудакова О.П., Золотаренко О.Д., Чимбай М.В., Загорулько І.В. Синтез платиновмісних вуглецевих наноструктур, як наповнювачів керамічної матриці для 3D друку технології CJP

39. Золотаренко Ол.Д., Золотаренко Ан.Д., Аханова Н.Е., Уалханова М., Щур Д.В., Габдуллін М.Т., Тарасенко Ю.О., Рудакова О.П., Золотаренко О.Д., Чимбай М.В., Загорулько І.В. Вплив марки графіту на плазмохімічний метод синтезу вуглецевих наноструктур

40. Золотаренко Ол.Д., Золотаренко Ан.Д., Аханова Н.Е., Уалханова М., Щур Д.В., Габдуллін М.Т., Тарасенко Ю.О., Рудакова О.П., Золотаренко О.Д., Чимбай М.В., Загорулько І.В. Плазмохімічний синтез вуглецевих наноструктур у рідкому середовищі

41. Золотаренко Ол.Д., Золотаренко Ан.Д., Аханова Н.Е., Уалханова М., Щур Д.В., Габдуллін М.Т., Тарасенко Ю.О., Рудакова О.П., Золотаренко О.Д., Чимбай М.В., Загорулько І.В. Електролітичний метод синтезу нанопорошків Ni та Cu

ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ У МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ

42. Гаврилюк А.Є Використання Імовірнісних Моделей Дифузії для генерації треків з детектора AT-TPC

43. Семенюк.Б.Ю Методи передбачення кристалічних структур в бібліотеці Python Atomic Simulation Environment (ASE)

44. Dmytro Kovalskyi, Rahul Chauhan, Hasan Ozturk, Andrii Len Predict cms data popularity to improve its availability for physics analysis

МІЖДИСЦИПЛІНАРНІ АСПЕКТИ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА

45. Гречиха О.С., Касаткін О.Л. Депінінг вихорів абрикосова у надпровідниках другого роду зі стовпчастими дефектами в поперечному магнітному полі

46. Ниркова Л.І., Клименко А.В., Харченко Ю.О., Лавренюк В.В. Дослідження електролітичного наводнювання сталі Х70 та труби тривалоексплу-атованого магістрального газопроводу

47. Kuznietsov P.M., Yaroschuk O.V., Biedunkova O.O., Pryshchepa A.M. Behaviour of dispersed particles in water treatment during lime softening and acid stabilisation treatment

48. Ниркова Л.І., Лісовський Ю. І., Файнберг Л. Й., Гончаренко Л.В., Корозійне розтріскування зварного з'єднання зі сталі контрольованої прокатки в умовах катодного захисту

49. Бернацький А.В., Сіора О.В., Юрченко Ю.В., Соколовський М.В., Коваль Ю.М., Фірстов Г.С., Кедровський С.М., Сліпченко В.М. Хімічна неоднорідність металу швів при лазерному зварюванні сталі AISI 321 у різних просторових положеннях

50. Ниркова Л.І., Браточкин О.В.*, Осадчук С.О., Гончаренко Л.В. Корозія від напруження сталі для магістральних газопроводів в умовах підземної корозії

51. Романський А.О., Денисюк Н.М., Мокляк С.В., Свістунов С.Я., Шадура В.М. DataverseUA: Впровадження репозиторію відкритих наукових даних в Україні

Квантові матеріали, технології, проєкти в Україні і світі

(огляд)

О.А. Кордюк

Київський академічний університет,
бул. Вернадського 36, Київ 03142, Україна

E-mail: kordyuk@kau.edu.ua

Хоча основою для розуміння властивостей всіх матеріалів протягом останніх ста років є квантова теорія конденсованих середовищ, словосполучення «квантові матеріали» стало використовуватись тільки нещодавно [1]. Це збірний термін, під який зібрали надпровідники, сильно-корельовані електронні системи, матеріали з електронним впорядкуванням, топологічні ізолятори (це все можна назвати «електронні квантові матеріали»), а також інші системи такі як ультра-холодні атоми. Поєднує ці матеріали “емержентність” [2] – поява нових властивостей, які є наслідком колективних квантових ефектів.

Очевидно, цей термін виник під впливом популярності і бурхливого розвитку «квантових технологій», під якими в основному розуміють квантові обчислення та комунікації. Тому у визначенні квантових матеріалів до емержентності часто додають їх перспективність для квантових застосувань. Останнім часом, ми активно будуємо містки між квантовими матеріалами і технологіями. І тут важливим є те, що розуміння особливостей електронної структури цих матеріалів, може допомогти створювати нові.

У доповіді зроблено короткий огляд перспективних квантових матеріалів, технологій та відповідних проєктів в Україні і світі, з фокусом на матеріалах для розробки надпровідних квантових комп`ютерів. Перспективність саме надпровідної реалізації квантових комп’ютерів доводить те, що найбільші комп’ютерні компанії, такі як Гугл, IBM та інші будують свої версії квантових комп’ютерів саме з надпровідних елементів, кубітів на основі переходів Дзозефсона, для яких основною проблемою є проблема декогеренції – порушення квантової заплутаності. Розуміння електронної структури, зокрема, геометрій поверхонь Фермі [3] матеріалів, що формують дзозефсонівський контакт, може як допомогти вирішити проблему декогеренції, так і створювати нові квантові пристрої [4].

1. The rise of quantum materials. *Nature Phys* **12**, 105 (2016). https://doi.org/10.1038/nphys3668

2. Robert Cava, Nathalie de Leon, and Weiwei Xie, Introduction: Quantum Materials. *Chemical Reviews* **121**, 2777 (2021). http://dx.doi.org/10.1021/acs.chemrev.0c01322

3. S. Borisenko, *et al.* Fermi surface tomography. *Nat. Commun.* **13**, 4132 (2022).

4. A. A. Kalenyuk, *et al.* Influence of the Fermi surface geometry on the Josephson effect between iron-pnictide and conventional superconductors. *Phys. Rev. B* **103**, 214507 (2021). http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.103.214507

НАНОМАТЕРІАЛИ ТА НАНОТЕХНОЛОГІЇ

ENERGY EFFICIENT ELECTRIC FIELD-INDUCED PRECESSIONAL SWITCHING OF TUNNEL MAGNETIC NANOSTRUCTURES

Korostil A.M.[1], Shaternik A.V.[2]
[1]Institute of Magnetism NAS of Ukraine, Vernadsky av.,36b, Kyiv-142, Ukraine
[2]Institute for Superhard Materials, Avtozavodska St. 2, Kyiv-074, Ukraine
[*]Phone: +38 068 402 15 29, E-mail: amand@imag.kiev.ua

The problem of electrically controlled remagnetization of magnetic nanostructures (as basic elements of magnetic memory) is related to increase energy efficiency and the high speed of transformation of the applied external electric field into an effective internal magnetic field resulting in a magnetic moment reorientation. The electric field can induce the reorientation of magnetic order parameters both ferro- (FM) and antiferromagnetic (AFM) type due to the voltage controlled modification of the magnetic anisotropy known as the voltage controlled magnetic anisotropy (VCMA) effect. This effect can underlie the low power and ultra-speed operation of magnetic tunnel junctions (MTJs) which are leading devices for field sensing, non-volatile magnetic random access memories (MRAM)and spin logic applications [1].

The VCMA based MTJs consist of two 3*d* magnetic nanolayers sandwiched by the tunnel barrier layer (e.g. MgO) characterizing by perpendicular magnetic anisotropy related to a preference of spins to align in the perpendicular direction because of interfacial or magnetocrystalline effect and CVMA effect of the electric field-induced change of occupancy of atomic orbitals and the Rashba spin-orbit coupling at the interface [1, 2].

The magnetic order of the free layer of MTJ freely switches its orientation under electrical or magnetic bias conditions while that of the pinned layer is fixed due to its relatively high coercitivity. Two stable equilibriums exist along an easy magnetic axis in the free layer. The parallel and antiparallel magnetic states of the MTJ correspond to parallel and antiparallel magnetic order parameters of the free and pinned layers, respectively. The voltage-driven switching between the mentioned magnetic states accompanying by the magnetic transition from uniaxial to the in-plane anisotropy with next ending magnetic switching. The corresponding magnetic dynamics precess towards the new stable position with frequency determined by the exchange field [2]. The switching of magnetic order parameter by a voltage pulse timed to its first half precession results in the 180^0 reorientation of the magnetic order vector. The voltage-controlled precession switching possessing by ultra high frequencies, energy efficiency and high bit density is of considerable interest for non- volatile MRAMs.

1. H. Lee, A. Lee, S. Wang, F. Ebrahimi., P. Gupta, P.K. Amiri, Analysis and Compact Modeling of Magnetic Tunnel Junctions Utilizing Voltage-Controlled Magnetic Anisotropy // *IEEE Transact. on Magnet*. **54**, 15 (2018). DOI: org/10.1109/TMAG.2017.2788010.
2. V. Lopes-Domingues, H. Almasi, and P.K. Amiri. Picosecond Electric-Field-Induced Switching of Antiferromagnet // *Phys.Rev.App*.,**11,** 02419 (2019). DOI:10.1103/Phys.Rev.Applied.11.024 019.

ВИДАЛЕННЯ АНІОНІВ Cr(VI) З ВОДНИХ РОЗЧИНІВ ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИМИ ПОЛІСИЛОКСАНОВИМИ МАТЕРІАЛАМИ

Петришин В.В.[1(*)], Столярчук Н.В.[2], Томіна В.В.[2], Мельник І.В.[2,3]

[1]Національний університет «Києво-Могилянська академія», вул. Григорія Сковороди 2, м. Київ 04655, Україна
[2]Інститут хімії поверхні ім.О.О.Чуйка НАН України, вул. Генерала Наумова 17, м. Київ 03164, Україна
[3]Інститут геотехніки САН,
вул. Ватсонова 45, м.Кошице 04001, Словаччина
[*]E-mail: volodymyr.pertryshyn@ukma.edu.ua

Забруднення хромом становить значну загрозу для довкілля. Токсичний Cr(VI) потрапляє до водойм з викиди металургійних підприємств, галузей хімічної промисловості, виробництва цементу та текстилю, автотранспорту. Можливе просочування Cr(IV) до підземних вод з хромітових шахт, а також через неналежну утилізацію відходів. Присутність токсичних залишків Cr(VI) у прісних водоймах і ґрунті негативно впливає на ріст рослин, здоров'я тварин та спричиняє різні проблеми зі здоров’ям у людей [1]. Згідно ВООЗ, гранично допустима концентрація Cr(VI) у питній воді 0,05 мг/л [2]. Одним із актуальних методів видалення аніонних форм хрому з води є адсорбція з використанням азотовмісних кремнійорганічних матеріалів. Тому в цьому дослідженні були одержані сорбенти з четвертинними амонійними функціональними групами одностадійним золь-гель методом. Отримані матеріали мають вигляд часток з вмістом груп до 3 ммоль/г. Дослідження кінетики сорбції хроматів показало, що встановлення рівноваги в таких системах відбувається протягом перших 15-60 хв, а ступінь вилучення сягає 99 %. Сорбційна ємність синтезованих органокремнеземів становить близько 40 мг/г. Отже, кремнеземи, з четвертинним азотом, можуть бути запропоновані для вилучення аніонних форм забрудників з водних розчинів.

Дослідники дякують за фінансову підтримку APVV-19-0302 та Міжнародному Вишеградському Фонду (№ 52310162).

1. L. McNeill, J. McLean, M. Edwards and J. Parks, *State of the science of hexavalent chromium in drinking water* (D.: WRF. 2012).
2. *Guidelines for drinking-water quality. Incorporating the First Addendum*, *fourth edition.* World Health Organization, (G.: WHO. 2017.).

NONLINEAR LOCALIZED WAVES AND THEIR STABILITY NEAR A COMBINED LINEAR AND NONLINEAR METASURFACE

Gerasimchuk V.S.[1], Gerasimchuk I.V.[1,2], Dromov V.V.[1(*)]

[1]National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Beresteisky Ave. 37, Kyiv 03056, Ukraine
[2]Institute of Magnetism of the National Academy of Sciences of Ukraine and Ministry of Education and Science of Ukraine, Vernadsky Blvd. 36b, Kyiv 03142, Ukraine
[*]E-mail: igor.gera@gmail.com

The study of dynamics of nonlinear waves in structured anharmonic media is always in the focus of attention of dynamics of nonlinear waves and solitons. Among others, a considerable attention is paid to the theoretical and experimental investigations of spatial localization of high power electromagnetic beams in structured media with metasurfaces. The model describing an optical metasurface consisting of both linear and nonlinear parts, in a linear medium, was introduced in work [1], and the stability analysis of solitons in combined linear and nonlinear potentials according to Vakhitov and Kolokolov criterion was presented in Ref. [2].

In the present work, we study both analytically and numerically the localized states of nonlinear waves propagating along a combined linear and nonlinear metasurface (defect layer). In the framework of the nonlinear Schrödinger equation with δ-functional potential containing both linear and nonlinear spatial perturbations, we describe all possible soliton states localized near such a metasurface in optically linear medium, and investigate their stability. Via the wave localization mainly at the metasurface, there nonlinear properties appear; consequently, we take into account the Kerr nonlinearity only in the defect layer. It is demonstrated that the soliton states localized near the metasurface can exist at any sign of anharmonicity inside the defect layer in the case of attraction of elementary excitations to the metasurface. However, for the mutual repulsion between the excitations inside the layer, the localized states can exist only in the case of attraction of elementary excitations to the metasurface. For all possible localized states, the total number of elementary excitations and total energy of the system were found. We performed the analysis of stability of all localized states and found that only soliton states with attraction of elementary excitations to the metasurface will be stable.

The present study can be useful for the description of corresponding systems in optics, in nonlinear dynamics of solids, structured media with metasurfaces, in Bose–Einstein condensation, etc.

1. B. A. Malomed and M. Ya. Azbel, *Phys. Rev. B*, **47**, Iss. 16: 10402 (1993). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.10402
2. H. Sakaguchi and B. A. Malomed, *Phys. Rev. A*, **81**, Iss. 1: 013624 (2010). https://doi.org/10.1103/PhysRevA.81.013624

Photosensitive Materials for Ordered Nanoobjects Based on Templates

Leonov D.S.[1(*)], Boboshko Ye.M.[1,2], Lytvyn R.V.[1], Kolesnichenko A.A[1]., Sezonenko A.Yu.[1], Minitska N.V.[1,2], Romashkina M.A.[1], Lukianenko I.V.[1,2], Byba Ie.G.[1,2], Yamshynskyi M. M.[1,2], Pysarevskyi B.Yu.[1], Barabash M.Yu.[1,2,3]

[1]Technical Centre, N.A.S. of Ukraine, 13, Pokrovs'ka Str., UA-04070 Kyiv, Ukraine
[2]National Technical University of Ukraine 'Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute' 37 Beresteiskyi Ave., UA-03056 Kyiv, Ukraine
[3]Gas Institute of National Academy of Sciences 39 Degtyarivska Str., UA-03113 Kyiv, Ukraine
[*]тел.: +38 044 4852371, +38 095 6997072 E-mail: dsleonov@gmail.com

The purpose of this work is to study the properties of amorphous molecular semiconductors (AMSs), which are used as templates for the development of ordered nanoobjects. Photosensitive AMSs are carbazole-containing compounds for recording optical information in real time. They have high sensitivity and spatial resolution, and can work in automatic mode without an operator. It is important to improve the characteristics of AMSs and modes of their application. When optimizing the composition of AMSs, the most important problem is to find out the mechanisms of thermalization of carriers, the quantum yield in AMSs under photoexcitation, and the electrophysical phenomena. The technique of thermally stimulated depolarization is used for the analysis of these processes. This technique makes it possible to study the kinetics of the electric charge formed due to the orientation of permanent dipoles or the charge trapped by such deep traps as structural defects, impurity centres, charges accumulated at the interphase boundaries in the film. The spectral sensitivity is measured for the samples comprised of thin layers of carbazole-containing materials, which were produced by pouring toluene solutions. As found out, the quantum yield of photogeneration is decreased at higher wavelengths of light. A model based on the assumption of the Newtonian nature of the dependence of the rate of energy loss for a non-equilibrium electron is proposed [1]. Within the framework of this model, the dependences of the length and time of thermalization on the frequency of the exciting light, the temperature of the AMSs, and the parameter determining the rate of loss of excess energy by a non-equilibrium carrier of electric charge are determined. As a result, a phenomenological model of the electrophotographic process is proposed, and the composition of the AMSs is optimized. A template with an area of ≅4 cm^2 and a spatial period of ≅3–1 μm is fabricated.

1. M.A. Zabolotnyy, M.Yu. Barabash, Ye.M. Boboshko, D.O. Grynko, A.A. Kolesnichenko, R.V. Lytvyn, A.Yu. Sezonenko, T.V. Loskutova, L.I. Aslamova, N.V. Minitska. // Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies **21**, No. 1: 57 (2023) https://doi.org/10.15407/nnn.21.01

RESISTIVE STUDIES OF DOPED INDIUM-TIN OXIDE SUPERCONDUCTING FILMS

Menesenko D.[1], Shapovalov A.[1], Belogolovskii M.[1], Aliev A.[2], Parra A.[2]

[1] Kyiv Academic University, 36 Vernadsky Blvd., 03142, Kyiv, Ukraine
[2] Alan G. MacDiarmid NanoTech Institute, University of Texas at Dallas, 800 West
E-mail: d.menesenko@kau.edu.ua

In low-dimensional metallic layers, the motion of carriers is restricted in certain directions. Its effect on the charge transport in non-superconducting films is usually controlled by the interplay of the sample thickness and the effective de Broglie wavelength of carriers. This is also true for 2D superconductors such as metallic nm-thick layers, some types of oxide interfaces and heterostructures. In this work, we have used magneto-transport measurements of doped indium-tin-oxide (ITO) films in order to probe their effective dimensions. The ITO thin layers belong to a family of transparent superconductors exhibiting zero resistance and high optical transparency simultaneously. Although the material properties of high electrical conductivity and optical transmittance seem to be mutually exclusive, a careful adjustment of the physical parameters in some functional materials like doped ITO has led to the development of wide-bandgap oxides with critical temperatures T_c of several K and small absorption in the infrared and visible regions.

Electrical non-local probing was carried out for a four-point configuration in the temperature range near the normal-to-superconducting transition. The temperature and angular effect on the critical field H_{c2} of Na- and Mg-doped $In_{2-y}Sn_yO_{3-\delta}$ layers ($y \sim 0.2$) with thicknesses about 200 nanometers certainly pointed to three-dimensionality of the samples was studied using resistive $R(T)$ measurements across the normal metal-to-superconductor transition fixed by the resistance drop. In this case, the transition temperature $T_c(H)$ in an applied magnetic field H defines the upper critical field as $H_{c2}(T=T_c(H)) = H$. Detailed analysis of the obtained data showed that the highest T_c and a fairly uniform superconducting state are achieved at a doping time near 1000 s with 0.1 mA/cm^2 cathodic current density. The relatively high critical magnetic fields of about 1-2 T in sodium and magnesium doped ITO films correspond to a short Ginzburg-Landau coherence length of nearly 13 - 18 nm. Moreover, we have revealed clear signs of two-dimensional character of the superconductivity in the studied samples.

It should be emphasized that finding a transparent superconductor suitable for fabricating electronics would be a major step toward the integration of superconducting circuits into quantum computers or superconducting classical readout with optical communication or detector architectures. Our work shows that the doped ITO superconductor is a good candidate for this role.

The joint activities in the field of electrochromic metal oxides for transparent superconducting electronics are supported by the NATO Science for Peace and Security Program, project G6082.

Thermally-induced evolution of structural and magnetic properties of Pt/Co bilayer stacks

Pedan R.[1(*)], Makushko P.[1,2], Dubikovskyi O.[1,3], Bodnaruk A.[1,4], Burmak A.[1], Makarov D.[2], Vladymyrskyi I.[1]

[1]Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute, Prospect Peremogy 37, Kyiv 03056, Ukraine.
[2]Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Institute of Ion Beam Physics and Materials Research, Bautzner Landstrasse 400, 01328 Dresden, Germany.
[3]V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Prospect Nauky 41, Kyiv 03680, Ukraine.
[4]Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Prospect Nauky 46, Kyiv 03028, Ukraine.
[*]Тел.: +38 095 729 0072 E-mail: roman1pedan@gmail.com

CoPt-based ferromagnetic thin films offer versatile applications, including spintronic devices [1] and high-density data storage media [2], making their research relevant.

In this study, we explore the effect of vacuum heat treatment on the structural and magnetic properties of Pt(14 nm)/Co(13 nm)/Ta(3 nm)/Si(001)/SiO_2 magnetron sputtered bilayer stacks. As-deposited samples have been subjected annealing in vacuum of 10^{-6} mbar in the temperature range 200 °C – 550 °C with a constant annealing duration of 30 min. Samples have been examined using X-ray diffraction, secondary ion mass spectrometry and vibrating-sample magnetometry.

Annealing of the investigated stacks leads to the thermally-activated diffusion intermixing of Co and Pt layers and the formation of a ordered $L1_2$-CoPt and disordered $A1$-CoPt phase at 450 °C. Since bulk diffusion is practically frozen at the investigated temperatures, we assume that mixing of layers occurs due to grain boundary diffusion [3].

Even though the annealing process at investigated temperatures doesn't result in the formation of long-range order, there is a noticeable rise in the measured coercivity with increasing annealing temperature. This observation may suggest the emergence of local order during the intermixing of separate layers through grain boundary diffusion.

The results obtained in this work will motivate further research on employing of low-temperature annealing for the formation of magnetically hard thin films based on CoPt.

1. T. Thi Be Lan et al., *Journal of Alloys and Compounds*, **938**, 168441 (2023). https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.168441
2. T. Fan et al., *Scientific Reports*, **12**: 2998 (2022). https://doi.org/10.1038/s41598-022-06779-3
3. D. L. Beke et al., *Prog. Mater. Sci.*, **98**: 625 (2018). https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2018.07.001

КЕРУВАННЯ НАМАГНІЧЕНІСТЮ КОМІРКИ ПАМ'ЯТІ КОМБІНОВАНИМ ІМПУЛЬСОМ ЛОКАЛЬНИХ МАГНІТНИХ ПОЛІВ

Джежеря Ю.І.[1,2], Полинчук П.Ю.[1(*)], Герасимчук І.В.[1,2], Кравець А.Ф.[1,3]

[1]Інститут магнетизму НАН України та МОН України, б-р Акад. Вернадського 36-б, Київ, 03142, Україна
[2]Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», просп. Берестейський 37, Київ, 03056, Україна
[3]Nanostructure Physics, Royal Institute of Technology, 10691 Stockholm, Sweden
[*]Тел.: +38 073 039 7410 E-mail: phenix77310@gmail.com

Розробка і вдосконалення енергонезалежної магнітної пам'яті (MRAM) залишається одним з головних напрямів досліджень в галузі наномагнетизму. Для таких застосувань вкрай важливо досягти надійної і швидкої переорієнтації намагніченості [1], що перевершує звичайне повільне перемикання прецесії, яке може займати до наносекунд для переорієнтації вектора намагніченості пристрою. Один з можливих шляхів подолання цих проблем полягає в застосуванні імпульсних магнітних полів [2] та спін-поляризованих струмів [3] для активації процесу перемагнічування.

У даній роботі теоретично досліджено проблему керування станами намагніченості комірки магнітної пам'яті за допомогою комбінованого імпульсу локальних зовнішніх полів. Локальне магнітне поле може бути створене імпульсами електричних струмів певної форми, що пропускаються через штатні провідники для керування комірками пам'яті. Його призначення полягає у порушенні колінеарності магнітних моментів спінового поляризатору із закріпленим магнітним моментом та вільного магнітного шару, що вкрай необхідно для ініціювання процесів переносу магнітного моменту. Показано, що при належному виборі конфігурації польового збурення (правильному підборі конфігурацій електричних струмів у провідних шинах) та тривалості імпульсу можна досягти режиму швидкісного і майже безінерційного перемикання намагніченості вільного шару (функціонального елементу) з переходом від одного рівноважного стану до іншого. Таким чином можна досягти швидкого безінерційного режиму перемикання напрямку намагніченості комірки пам'яті при найнижчих значеннях густини струмів. Визначено оптимальні форми, послідовності та амплітуди польових імпульсів.

1. Q. F. Xiao, B. C. Choi, J. Rudge, Y. K. Hong, G. Donohoe, *J. Appl. Phys.*, **101**: 024306 (2007). https://doi.org/10.1063/1.2424526
2. T. Devolder, J. Hayakawa, K. Ito, H. Takahashi, S. Ikeda, P. Crozat, N. Zerounian, J.-V. Kim, C. Chappert, H. Ohno, *Phys. Rev. Lett.*, **100**: 057206 (2008). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.057206
3. T. Devolder, C. Chappert, J. A. Katine, M. J. Carey, K. Ito, *Phys. Rev. B*, **75**: 064402 (2007). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.064402

АНАЛІЗ ФЛУКТУАЦІЙНОЇ ПРОВІДНОСТІ ПЛІВОК $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ У СИЛЬНИХ МАГНІТНИХ ПОЛЯХ

Петренко Є. В.[1], Блудова Л. В.[1], Колесніченко Ю.А. [1], Шитов М. В.[1], Рогацький К.[2], Соловйов А. Л.[1,3]

[1]Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Вєркіна НАН України, пр. Науки, 47, м. Харків, 61103, Україна
[2]Інститут низьких температур і структурних досліджень Польської академії наук, Вроцлав 50-950, Польща
[3]Фізичний факультет Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна, 61022 Харків, Україна
[*]Тел.: +38 0675367574 E-mail: shytovnikita@gmail.com

Вже багато робіт присвячено вивченню високотемпературної надпровідності (ВТНП) та такому незвичному явищу як псевдощілина (ПЩ) [1,2 і посилання в них], що відкривається в купратних надпровідниках вище характеристичної температури $T^* >> T_c$, де T_c – температура переходу речовини у надпровідний стан. Попри це, механізми надпровідного спарювання, що дозволяють отримувати $T_c >> 100$ K, залишається досі нез'ясованим.

Отримання інформації про вплив такого вагомого чинника як зовнішнє магнітне поле на надлишкову провідність і особливо на флуктуаційну провідність (ФЛП) і ПЩ в купратах має посприяти в подальшому розумінні вищезгаданих механізмів.

Ми повідомляємо про вплив магнітного поля до 8 Тл на питомий опір $\rho(T)$ у площині ab і флуктуаційну провідність в тонких плівках $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ [3]. Усі дослідження проводили в інтервалі температур, що відповідає переходу плівки у надпровідний стан. Отримана флуктуаційна провідність при ~ 3 Тл і вище демонструє особливість, що виражена у спостереженні двомірного внеску теорії Асламазова-Ларкіна у ФЛП замість зазвичай спостережуваного двомірного внеску теорії Макі-Томпсона за відсутності магнітного поля. Суттєво, що при ~ 3 Тл різко збільшується інтервал надпровідних флуктуацій, а саме в 7 разів. Відповідно, довжина когерентності вдовж осі c при 0K демонструє досить незвичну залежність від магнітного поля, що спостерігається вперше.

1. A. L. Solovjov and V. M. Dmitriev, *Low Temp. Phys.* **32**, No. 2: 139 (2006).https://doi.org/10.1063/1.2171509
2. A. L. Solovjov and V. M. Dmitriev. *Low Temp. Phys.* **35**, No. 3: 169 (2009). https://doi.org/10.1063/1.3081150
3. E. V. Petrenko, L. V. Omelchenko, Yu. A. Kolesnichenko, N. V. Shytov, K. Rogacki, D. M. Sergeyev and A. L. Solovjov, *Low Temp. Phys.* **47**, No. 12: 1148 (2021). https://doi.org/10.1063/10.0007080

СРІБНІ НАНОСТРИЖНІ ЯК ОСНОВА МОНОКОМПОНЕНТНОГО МАТЕРІАЛУ З ПРЕЦИЗІЙНИМИ ВЛАСТИВОСТЯМИ

Солдатенко О.М.[1(*)], **Філатов О.В.**[1]

[1] *Лабораторія фізики та радіометрії нерівноважних транспортних явищ, Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, м. Київ, бульвар Академіка Вернадського 36, Україна*

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

Матеріали з прецизійними властивостями набувають все більшого значення в електроніці, наприклад, при створенні актуаторів для електро-механічних систем, у медицині та в ряді інших галузей. При цьому, відомі на сьогодні матеріали, які проявляють незмінність властивостей, є доволі складними багатокомпонентними сплавами зі складним стехіометричним складом. Враховуючи цю особливість, спроби створити з таких сплавів мініатюрні компоненти, наприклад компоненти мікро- і нано-електромеханічних систем, не мають успіху, оскільки. при суттєвому зменшенні розмірів готового виробу, втрачається правильне стехіометричне співвідношення компонентів сплаву і матеріал втрачає прецизійні властивості.

В роботі [1] було досліджено вплив розміру срібних наночастинок на їхні теплові властивості. Зокрема, досліджувались зміни коефіцієнтів лінійного теплового розширення срібних наностриженів зі зміною температури в інтервалі температурної стабільності зазначених наночастинок. Виходячи із результатів дослідження, срібні наностриженів з діаметром поперечного перерізу 10,8 нм проявляють сталий коефіцієнт теплового розширення в інтервалі температур 150 К – 450 К. Такі наностриженів можуть бути основою для прецизійного матеріалу зі сталим тепловим розширенням і, оскільки це монокомпонентний матеріал, який не потребує дотримання стехіометричного співвідношення компонентів, то можуть бути використані при створенні пристроїв для мікро- і наноелектроніки.

На основі отриманих результатів щодо незмінності коефіцієнта лінійного теплового розширення срібного наностриженя певного діаметру, зареєстровано патент на винахід [2], в якому описано спосіб отримання таких наностриженів.

1. O. Filatov, and O. Soldatenko, Size dependence of thermal expansion of silver nanowires, *Appl. Nanosci*. **10(12)**, 4827-4830 (2020). https://doi.org/10.1007/s13204-020-01487-8

2. Спосіб одержання прецизійного наноматеріалу на основі срібних наностриженів зі сталим температурним коефіцієнтом розширення / Філатов О. В., Погорелов О. Є., Солдатенко О. М. / Патент на винахід № 127523, заявка № a202102568.

ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОЧАСТИНОК ОКСИДУ ЦИНКУ, ОДЕРЖАНИХ МЕТОДОМ КОЛОЇДНОГО СИНТЕЗУ

Варварін М. О.[1(*)], **Ніцук Ю. А.**[2]

[1]Київський Академічний Університет НАН та МОН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36, 03142, Київ, Україна,
[2]Одеський національний університет імені І. І. Мечникова,
вул. Дворянська, 2, 65082, Одеса, Україна
[*]Тел.: +38 096 472 7225 E-mail: m.varvarin@kau.edu.ua

Наночастинки широкозонних напівпровідників, представником яких є оксид цинку, завдяки власному поглинанню в ультрафіолетовій області отримали широке практичне застосування в косметології, біології та медицині, засобах обеззаражування води. Для оптоелектроніки перспективною є можливість реалізації ефективного власного та домішкового випромінювання в широкому інтервалі довжин хвиль — від ультрафіолетового діапазону до інфрачервоного.

Головними труднощами до реалізації широкого практичного застосування зазначених наночастинок є складність технологій синтезу. Наявна інформація про методи синтезу свідчить про протікання реакцій за високих температур, що робить неконтрольованим ріст наночастинок в процесі синтезу.

В даній роботі було синтезовано наночастинки оксиду цинку колоїдним методом. Шляхом варіювання технологічних параметрів (концентрації та температури) отримано колоїдні наночастинки ZnO з різною шириною забороненої зони. Було проведено дослідження спектрів поглинання і фотолюмінесценції одержаних зразків.

Через квантоворозмірні ефекти зі зменшенням розміру частинок має відбуватися зсув піку поглинання у бік більших енергій. Показано, що завдяки підбору режимів синтезу колоїдним методом можна одержувати частинки ZnO з розмірами від одиниць нанометрів (у розчині желатину) до сотень мікрон (без желатину), що підтверджується поведінкою спектрів поглинання. На рисунку 1 представлено результати порівняння спектрів фотолюмінесценції у видимій області спектру для зразків ZnO з середнім розміром частинок 21 нм та для мікрочастинок. Зміна розмірів частинок, а відповідно, і ширини забороненої зони не призводить до зсуву максимумів ліній випромінювання. Це свідчить про те, що у видимій області спектру спостерігається лише випромінювання, обумовлене переходами між енергетичними рівнями дефектів. Одержані наночастинки можуть бути використані, наприклад, у сенсорах складних хімічних

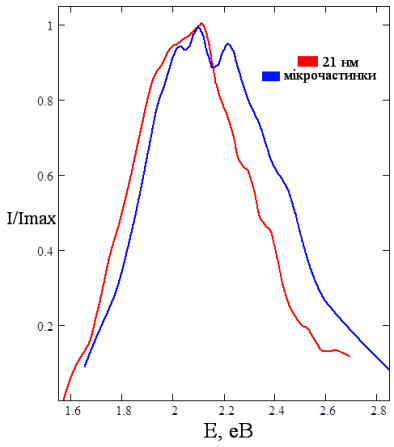


Рис. 1. Спектри фотолюмінесценції зразків ZnO під дією азотного імпульсного лазеру.

Нові низькоенергетичні метастабільні стани дихалькогенідів TiX_2(X=S, Se, Te) з хвилями зарядової густини, отримані за допомогою еволюційних розрахунків

Фея О.Д.[1, 2]

[1] *Київський академічний університет, Київ, бул.Вернадського 36, Україна*
[2] *Інститут металофізики ім.Г.В.Курдюмова, бул.Вернадського 36, Україна*
[*] *Тел.: +38 093 7222 607 E-mail: feyaolkodmi@gmail.com*

Дихалькогеніди перехідних металів – це клас шаруватих квазі-двовимірних ван-дер-Ваальсових матеріалів з загальною формулою MX_2, де M – перехідний метал, а X – халькоген. Вони складаються з шарів X-M-X, які можна легко відшарувати і дослідити на різноманітних підкладках. Такий простий спосіб утворення наноструктур та багата фізика дихалькогенідів робить їх чудовими кандидатами для застосування в спінтроніці, наноелектроніці, для зеленої енергетики, біохімічних застосувань. [1]

Однією з ключових особливостей дихалькогенідів перехідних металів є хвилі зарядової густини (CDW, charge density waves), що часто супроводжують надпровідність на фазових діаграмах [2]. Типовим прикладом є 1T-$TiSe_2$, в якому перехід до CDW-стану відбувається при температурі близько 200 К.

На доповіді я покажу результати еволюційного пошуку низькоенергетичних метастабільних станів дихалькогенідів в ряду TiX_2 (X = S, Si, Te). Ці матеріали можна отримати ізовалентною підстановкою халькогену, проте їхні властивості дуже різні. Тоді як напівметал $TiSe_2$ є класичним матеріалом з CDW, в $TiTe_2$ нема жодних натяків на цю властивість, а TiS_2 взагалі є напівпровідником з невеликою забороненою зоною [3, 4]. Були встановлені суттєві відмінності в метастабільних станах цих матеріалів. В ході розрахунків були отримані низькоенергетичні стани TiS_2 та $TiSe_2$, які можна ідентифікувати як стани з хвилями зарядової густини. В той же час в $TiTe_2$, який не показує цих властивостей, низькоенергетичних метастабільних станів не існує.

1. Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J. N. Coleman, and M. S. Strano, *Nature Nanotechnology*, vol. 7, no. 11. Nature Publishing Group, pp. 699–712, Nov. 06, 2012, doi: 10.1038/nnano.2012.193.
2. E. Morosan *et al.*, *Nat. Phys.*, vol. 2, no. 8, pp. 544–550, Aug. 2006, doi: 10.1038/nphys360.
3. D. K. G. de Boer *et al.*, *Phys. Rev. B*, vol. 29, no. 12, p. 6797, Jun. 1984, doi: 10.1103/PhysRevB.29.6797.
4. K. Dolui and S. Sanvito, *EPL*, vol. 115, no. 4, p. 47001, Aug. 2016, doi: 10.1209/0295-5075/115/47001

Особливості створення полімер-дефектних ВНТ матеріалів

Михайлова Г.Ю.[1*], Якимчук М.М.[1], Шевченко М.Я.[1], Лень Є.Г.[1,2]

[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
mihajlova.halina@gmail.com

Одним із перспективних напрямів отримання матеріалів із заданими властивостями є розробка полімерних матеріалів, модифікованих вуглецевими наноструктурами (фулеренами та нанотрубками), які до нього вводяться шляхом змішування та рівномірного диспергування на мікронному рівні. При цьому істотно змінюються фізико-механічні та термодеформаційні характеристики полімерів. Композитні матеріали можуть набувати властивостей не притаманних вихідним компонентам. Додавання незначної кількості дефектних вуглецевих нанотрубок (ВНТ) до діелектричної матриці сприяє появі електропровідності, величина якої має широкий діапазон, обумовлений комплексною взаємодією різних факторів, найбільш важливі з яких власна провідність ВНТ та їх контактний опір. Додавання ВНТ до полімеру суттєво покращує міцнісні властивості матеріалу, що можливо завдяки наявності хімічної взаємодії між поверхнею нанотрубки та молекулами полімеру, енергія якої на порядки перевищує відповідне значення енергії ван-дер-ваальсової взаємодії. Незначна кількість ВНТ змінює у широких межах електропровідність полімерної матриці. Електропровідні вуглецеві наповнювачі при введенні їх до полімерної матриці здатні значно знижувати електроопір композитного матеріалу.

Для композитів полімер–ВНТ характерно збереження переваг полімерної матриці, але при цьому додатково вони набувають ознак міцнішого та електропровідного вуглецевого наповнювача. У таких композитах можна використовувати одночасно декілька із зазначених способів радикальної зміни властивостей матеріалів.

Так було отримано, що перехід в провідний стан для таких матеріалів відбувається при 3,5 мас. % ВНТ.

ЕНЕРГЕТИЧНІ ЕФЕКТИ УТВОРЕННЯ КЛАСТЕРІВ ОРТОСИЛІКАТНОЇ ТА МЕТАНСУЛЬФОНОВОЇ КИСЛОТИ У ВОДНОМУ РОЗЧИНІ

Мандрика А.Г.[1], Пасенко О.О.[1], Осокін Є.С.[2(*)], Верещак В.Г.[1]

[1]Український державний хіміко-технологічний університет, просп. Гагаріна, 8, Україна
[2]Дніпровський ліцей «Primus Inter Pares School», вул. Січеславська Набережна, 53, Україна
[*]Тел.: +38 096 828 58 46 E-mail: osokin@cf.dnu.dp.ua

Мета роботи: встановити залежність стабільності кластерів $[H_4SiO_4 \cdot nCH_3SO_3^-](CH_3SO_3^-)_{(4-n)}$ від кількості аніонів $CH_3SO_3^-$ у внутрішній сфері кластеру за допомогою методів квантово-хімічного моделювання з використанням програмного пакету Gaussian 09 на рівні DFT. Детальна методика розрахунків наведена в роботі [1].

Було показано, що кластер $[H_4SiO_4 \cdot 4CH_3SO_3^-]$ є найбільш стабільною системою в порівнянні з іншими досліджуваними кластерами, оскільки має найнижчі значення розрахункових енергій E_{ZPE}, E_G, E_H.

Енергетичний ефект послідовного приєднання аніонів $CH_3SO_3^-$ до H_4SiO_4 має незначне зменшення. Так приєднання першої молекули $CH_3SO_3^-$ до H_4SiO_4 має найбільше значення –27,48 кДж/моль (1), а енергетичний ефект приєднання другої, третьої та четвертої молекули $CH_3SO_3^-$ має значення –23,28 та –19,85 та –17,28 кДж/моль, відповідно. Загальний енергетичний ефект приєднання всіх чотирьох молекул $CH_3SO_3^-$ становить –87,89 кДж/моль, що є лише в три рази більше ніж енергетичний ефект приєднання однієї молекули $CH_3SO_3^-$.

$H_4SiO_4 + CH_3SO_3^- \rightarrow [H_4SiO_4 \cdot CH_3SO_3^-]$ –27,48 кДж/моль (1)
$[H_4SiO_4 \cdot CH_3SO_3^-] + CH_3SO_3^- \rightarrow [H_4SiO_4 \cdot 2CH_3SO_3^-]$ –23,28 кДж/моль (2)
$[H_4SiO_4 \cdot 2CH_3SO_3^-] + CH_3SO_3^- \rightarrow [H_4SiO_4 \cdot 3CH_3SO_3^-]$ –19,85 кДж/моль (3)
$[H_4SiO_4 \cdot 3CH_3SO_3^-] + CH_3SO_3^- \rightarrow [H_4SiO_4 \cdot 4CH_3SO_3^-]$ –17,28 кДж/моль (4)

Були проведені розрахунки енергетичних ефектів димеризації H_4SiO_4 та кластерів на її основі. Видно, що за реакцією (7) димеризація H_4SiO_4 у складі кластеру $[H_4SiO_4 \cdot 4CH_3SO_3^-]$ є досить енергетично ускладненою в порівняння з димеризацією (6) кластеру $[H_4SiO_4 \cdot 4H_2O]$ на 60 кДж/моль.

$H_4SiO_4 + H_4SiO_4 \rightarrow H_6Si_2O_7 + H_2O$ –23,40 кДж/моль (5)
$[H_4SiO_4 \cdot 4H_2O] + [H_4SiO_4 \cdot 4H_2O] \rightarrow H_6Si_2O_7 + 9H_2O$ 91,87 кДж/моль (6)
$[H_4SiO_4 \cdot 4CH_3SO_3^-] + [H_4SiO_4 \cdot 4CH_3SO_3^-] \rightarrow H_6Si_2O_7 + 8CH_3SO_3^- + H_2O$
152,38 кДж/моль (7)

1. A.G. Mandryka, O.O. Pasenko, V.H. Vereschak, Y.S. Osokin, *Journal of Chemistry and Technologies*., **30**, No. 2: 159 (2022). (in Ukrainian) https://doi.org/10.15421/jchemtech.v30i2.258938

КОНСТРУКЦІЙНІ ТА ФУНКЦІОНАЛЬНІ МАТЕРІАЛИ

ФІЗИКО-ХІМІЧНІ УМОВИ ПРОЦЕСУ ДИФУЗІЙНОГО ХРОМОСИЛІЦІЮВАННЯ ВУГЛЕЦЕВИХ СТАЛЕЙ В СЕРЕДОВИЩІ ХЛОРУ

Погребова І.С.,[1] Янцевич К.В.[2]

[1]«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», просп. Берестейський, 37, 03056, Київ, Україна
[2] Інститут електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України, вул. Казимира Малевича 11,40001, Київ, Україна

З використанням пакету прикладних програм «ASTRA CHEQC» та «HSC 5,0» з базою термодинамічних даних було проведено теоретичний аналіз фізико-хімічних умов дифузійного насичення сталей кремнієм та хромом у середовищі хлору у замкнутому реакційному просторі за умов пониженого тиску середовища. Аналіз термодинамічних розрахунків дозволили оцінити фізико-хімічні умови формування на поверхні сталей дифузійних покриттів на основі хрому та кремнію (**табл.)**.

Таблиця - Розрахунки рівноважного складу реакційного середовища при хромосиліціюванні (температура 1200…1400 К, тиск 10^2 Па)

№ п/п	Вихідні елементи системи, вміст (моль)	Склад реакційної суміші	
		газова фаза	конденсирована фаза
1.	Si-Cr-Cl=2,5-2,5-1	Si, $SiCl_4$, $SiCl_3$, $SiCl_2$, SiCl, Cr, CrCl,$CrCl_2$, $CrCl_3$	CrSi, Cr_5Si_3
2.	Si-Cr-Cl-C=3,5-5,0-2,0-1,0	$SiCl_4$, $SiCl_3$, $SiCl_2$, SiCl, $CrCl_3$, $CrCl_2$	Cr_7C_3, SiC
3.	Si-Cr-Cl-C=0,5-4,5-2,0-1,0	Cl, Cl_2, $SiCl_4$, $SiCl_3$, $SiCl_2$, SiCl, Cr, CrCl, $CrCl_2$ $CrCl_3$,	Cr_7C_3, Cr_3Si, Cr_2Si_3

З використанням складу системи №2 (**см табл**.) було проведено насичення сталі 45 хромом та кремнієм в замкнутому реакційному середовищі на протязі 6 годин при температурі 1273 К та тиску 10^2 Па.

Встановлено, що дифузійні покриття за участю хрому та кремнію, нанесені на поверхню сталі 45, згідно з даних РСФА, складаються з зовнішнього шару до $20\cdot10^{-6}$ м, який містить карбіди хрому $Cr_{23}C_6$, Cr_7C_3 та внутрішнього шару до $90\cdot10^{-6}$ м, який представляє собою твердий розчин кремнію та хрому у α–залізі. Загальна товщина покриття складає 110 мкм.

Показано, що нанесення на поверхню сталі 45 хромосиліцидних покриттів призводить до підвищення її жаростійкості та корозійної стійкості у різних агресивних середовищах.

TEMPERATURE-CONTROLLED MAGNETIZATION REVERSAL IN NANOSCALE SYNTHETIC ANTIFERROMAGNETIC DISKS

Borynskyi V.Yu.[1(*)], Polishchuk D.M.[2], Savina Yu.O.[3], Pashchenko V.O.[3], Kravets A.F.[1,2], Tovstolytkin A.I.[1], Korenivski V.[2]

[1] Institute of Magnetism of the NAS of Ukraine and MES of Ukraine, 36-b Akad. Vernadskogo blvd., Kyiv, Ukraine
[2] Nanostructure Physics, Royal Institute of Technology, Hannes Alfvéns väg 12, Stockholm, Sweden
[3] B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, 47 Nauky Ave., Kharkiv, Ukraine
[*]Tel.: +38 068 928 6729 E-mail: vladyslav.borynskyi@imag.kiev.ua

One of the tasks nanomagnetism is currently revolving around is the search for energy efficient means on localized thermal regulation, highly important for various biomedical applications [1]. Synthetic antiferromagnetic multilayers (SAF) provide a promising solution, as due to their unique assembly they are able to not only remain in a preliminary chosen magnetic state, ferromagnetic or antiferromagnetic, but also exhibit temperature-controlled magnetization reversal. For instance, it has been recently shown [2] how such SAF switching, driven by the phase transition of the diluted weakly ferromagnetic spacer FeCr, enables giant magnetocaloric effect.

In our study [3] we demonstrate the possibility to introduce similar thermomagnetic switching in the nanoscale planar disks Py/$Ni_{60}Cu_{40}$/Py, which is caused by suppression of the interlayer dipolar interaction, effectively transforming the multilayered disks into quasi-single-layer ferromagnetic elements. The non-monotonous temperature dependence of the SAF coercivity traces the changes in energy balance during this process. The Curie point of the diluted spacer NiCu ($T_C \approx 150$ K) coincides with the minimum of the coercivity, when competing dipole and exchange field contributions become equal. Under these conditions the coercive force is determined solely due to the anisotropic properties of the layers constituting the SAF element. On further cooling the SAF arrays in the range $T < T_C$, the coercivity rapidly increases, what we prescribe to the enhancement of magnetic ordering and magnetocrystalline anisotropy in the diluted spacer NiCu.

1. L. Peixoto, R. Magalhães, D. Navas, S. Moraes, C. Redondo, R. Morales, J. P. Araújo and C. T. Sousa, *Appl. Phys. Rev.*, **7**, No. 1: 011310 (2020).
https://doi.org/10.1063/1.5121702
2. D. M. Polishchuk, Yu. O. Tykhonenko-Polishchuk, E. Holmgren, A. F. Kravets, A. I. Tovstolytkin and V. Korenivski, *Phys. Rev. Materials*, **2**, No. 11: 114402 (2018).
https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.2.114402
3. V. Yu. Borynskyi, D. M. Polishchuk, Yu. O. Savina, V. O. Pashchenko, A. F. Kravets, A. I. Tovstolytkin and V. Korenivski, *Low Temp. Phys.*, **49**, No. 7: 863 (2023).
https://doi.org/10.1063/10.0019699

Нові матеріали для зберігання водню на основі евтектичних сплавів системи Ti-Zr-Mn-V-Ni

Дехтяренко В.А. Прядко Т.В.

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] перспективи використання у якості матеріалу для безпечного зберігання та транспортування водню у зв'язаному стані (гідрид), евтектичних сплавів системи Ti-Zr-Mn-V, зі структурою фази Лавеса типу C14 та ОЦК-твердого розчину. Проте, неперервно зростаючи вимоги до матеріалів акумуляторів водню, вимагають постійного вдосконалення вже існуючих композицій. Досягти покращення сорбційних властивостей є можливим завдяки додатковому легуванню, як це було доведено неодноразово [1]. Додаткове легування даних сплавів, елементом здатним взаємодіяти з воднем (наприклад нікелем), відкриває нові горизонти для їх практичного використання в якості матеріалів для зберігання водню у зв'язаному стані. З метою встановлення впливу нікелю на водневосорбційні властивості евтектичних сплавів системи Ti-Zr-Mn-V, було виплавлено раніше досліджений сплав $Ti_{47,5}Zr_{28}Mn_{22,5}V_2$ [2] в якому було частково замінено марганець який не взаємодіє з воднем на 5 ат.% нікелю.

Методом скануючої електронної мікроскопії було встановлено, що після часткової заміни марганцю на нікель, у зазначених межах, змін у структурі вихідного сплаву не відбулося. Проте, методом рентгенівського фазового аналізу було встановлено, що у фазовому складі сплаву $Ti_{47,5}Zr_{28}Mn_{17,5}V_2Ni_5$ окрім фази Лавеса типу C14 та ОЦК-твердого розчину також були виявлені сліди нової фази, інтерметаліду $(Ti,Zr)(Mn,V,Ni)_{2-x}$. Присутність інтерметаліду $(Ti,Zr)(Mn,V,Ni)_{2-x}$ свідчить проте, що не весь введений у сплав нікель розчиняється у вихідних фазах.

Досліджуваний сплав $Ti_{47,5}Zr_{28}Mn_{17,5}V_2Ni_5$ витримували у атмосфері водню при тиску 0,6 МПа та кімнатній температурі впродовж 24 годин. Зазначені умови гідрування, не призвели до активації поверхні і відповідно активного поглинання водню досліджуваним сплавом. Сплав було додатково витримано при вказаних параметрах гідрування впродовж 50 годин, але збільшення часу витримки не призвело до активації поверхні і, відповідно, до помітного поглинання водню, інтенсивна сорбція водню сплавом розпочалась лише після нагрівання. Активне поглинання водню сплавом розпочалось при температурі 345 °C, а сам процес поглинання продовжувався лише 10 хвилин. При насиченні досліджуваного сплаву воднем відбулося повне руйнування монолітного зразку до стану порошку, через високу швидкість протікання процесу взаємодії (лише 10 хвилин), а отже, недостатність часу для релаксації напружень. Кінцевий продукт гідрування сплаву складався з гідриду на основі фази Лавеса типу C14, δ-гідриду на основі ОЦК-твердого розчину. Кількість поглинутого водню при кімнатній температурі та атмосферному тиску становила 2,70 мас.%.

При кімнатній температурі пониження тиску водню від 0,6 до 0,002 МПа не призводить до початку активного процесу виділення водню. Виділення водню спостерігалось лише при нагріванні. Так, при початковому тиску 0,0002 МПа виділення водню з гідридів отриманих на основі досліджуваного сплаву $Ti_{47,5}Zr_{28}Mn_{17,5}V_2Ni_5$, розпочалось при температурі 40 °C, а при досягненні температури 490 °C вдалося досягти повної десорбції.

1. V.A. Dekhtyarenko, D.G. Savvakin, V.I. Bondarchuk, V.M. Shyvanyuk, T.V. Pryadko, and O.O. Stasiuk, $TiMn_2$-Based Intermetallic Alloys for Hydrogen Accumulation: Problems and Prospects, *Progress in Physics of Metals*, 22, No. 3: 307–351 (2021). https://doi.org/10.15407/ufm.22.03.307

2. V.G. Ivanchenko, V.A. Dekhtyarenko, and T.V. Pryadko, Hydrogen Sorption Properties of $Ti_{0,475}Zr_{0,3}Mn_{0,225}$ Eutectic Alloy Alloyed with 2 at.% and 5 at.% of Vanadium, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 4: 521—530 (2015). https://doi.org/10.15407/mfint.37.04.0521

Сплав на основі кобальту (сплав типу ХТН) для створення захисного покриття на титані від дії водневого середовища.

Дехтяренко В.А., Бошко О.І., Загорулько І.В.
Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ, Україна
Тел.: +38 044 424 12 20 E-mail: Devova@i.ua

Титан та сплави на його основі можуть легко вступати в реакцію з воднем, що призводить до різкого зниження їх міцності та пластичності і як результат, передчасне руйнування деталей машин та конструкцій. Для можливості працювати титану та сплавам на його основі у водневому середовищі і при підвищених температурах вже розроблено досить велика кількість захисних покриттів [1]. Проте, активне використання водню в різних технологічних процесах, постійно потребує розроблення нових класів матерів для їх захисту від негативної дії водневого середовища.

На даний час, розроблено новий клас зносостійких кобальтових сплавів серії ХТН призначених для експлуатації при високих температурах в вузлах тертя енергетичного обладнання [2]. Крім того, сплави даного типу, також є стійкими і у агресивному водневому середовищі до температури 700 °С. Проте, фізико-механічні властивості даних сплавів, не дозволяють відомими методами отримувати з них порошки в достатній кількості, для подальшого практичного використання в якості матеріалу при створенні захисних покриттів, що і вимагає пошуку нових підходів для отримання з них порошків.

Встановлено, що додаткове легування кобальтового сплаву типу ХТН бором в кількості 1,7 мас.%, ванадієм 4,0 мас.% та варіація основних компонентів сплаву, дозволили розробити методику отримання порошку в достатній кількості для практичного використання.

Для встановлення водневосорбційних властивостей отриманого порошку його було досліджено у атмосфері газоподібного водню за наступною методикою. На першому етапі, витримано при тиску водню 0,2 МПа впродовж 20 годин при кімнатній температурі, після цього тиск в камері було збільшено до 2,0 МПа. На другому етапі проведено нагрів зразка до температури 630 ± 10 °С з послідуючим охолодженням до кімнатної температури. При зазначеному нагріві тиск водню в камері змінювався в межах від 2,0 до 3,0 МПа. Після зазначеного нагріву, при тиску водню в камері 2,0 МПа та за кімнатної температури зразок додатково витримувався впродовж 140 годин. Встановлено, що при зазначеній обробці не відбувається взаємодії між досліджуваним порошком та газоподібним воднем.

Для отримання високої адгезії створеного захисного покриття та матеріалу основи, було відібрано порошок розміром 45 мкм. Захисне покриття на титановий зразок кубічної форми, наносилось плазмовим методом на повітрі в декілька етапів, щоб створити суцільний бар'єр на усій поверхні зразка. За допомогою скануючої електронної мікроскопії встановлено, що при нанесенні захисного покриття, зазначеним методом, відбувається оплавлення поверхні порошинок та в подальшому, при осадженні їх на поверхню основи, взаємодія між собою. Це дозволяє, отримати на поверхні основи достатньо суцільний шар, утворений завдяки взаємній дифузії.

1. T.V. Pryadko, V.A. Dekhtyarenko, V.I. Bondarchuk, et. al, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol*., **42**, No.10: 1419–1429 (2020). https://doi.org/10.15407/mfint.42.10.1419
2. T.S. Cherepova, G.P. Dmitrieva, A.V. Nosenko and A.M. Semirga,. *Science and Innovation*. **10**, No.4.: 20–28. (2014). https://doi.org/10.15407/scin10.04.022

Сплав $Ti_{15,5}Zr_{30}Mn_{38}V_{5,5}Cr_{5,5}Co_{5,5}$ на основі фази Лавеса типу С14 для сорбції водню

Дехтяренко В.А.

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

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

Сучасний розвиток водневих технологій, постійно потребує нових матеріалів-акумуляторів водню з високою водневою ємністю, швидкою кінетикою поглинання й виділення водню, що обумовлено необхідністю швидкої перезарядки водневого акумулятора та збільшенням часу роботи на одній зарядці. Це пов'язано, з одного боку, з застосуванням водневих джерел енергії у транспортній сфері, а також, що особливо важливо в теперішній час, із застосуванням їх при лікуванні хворих на COVID-19.

Серед існуючого різноманіття розроблених на сьогоднішній день матеріалів акумуляторів водню особливе місце займають інтерметаліди типу AB_2 (фаза Лавеса) [1]. Це пов'язано з тим, що на відміну від типу AB_5 ($LaNi_5$) вони мають вищу водневу ємність, а у порівнянні з типом AB (TiFe), полегшений процес активації. Основним представником інтерметалідів типу AB_2 є сполука $TiMn_2$ (фаза Лавеса типу С14). Оскільки він легко активується при кімнатній температурі та тиску 3,2 МПа [10], виділяє весь поглинутий водень при нагрів до температури 400 °С, має значну водневу ємність ~ 1,0 Н/Ме, велику область гомогенності 11 ат. % та малу питому вагу. Незважаючи на всі зазначені переваги бінарного інтерметаліду $TiMn_2$, на даний час, при створенні матеріалів акумуляторів водню використовують більш складні легувальні системи. Використовуючи зазначений підхід (легування) нами [2] було розроблено сплав $Ti_{15,4}Zr_{30,2}Mn_{44}V_{5,4}Cr_5$, зі структурою фази Лавеса, який легко активується при кімнатній температурі та тиску водню лише 0,23 МПа, досягає водневої ємності на рівні 2,12 мас.%. Проте, постійно зростаючи вимоги до даних матеріалів (час роботи на одній зарядці) вимагають постійного вдосконалення запропонованих композицій. Досягти покращення зазначених властивостей є можливим завдяки додатковому легуванню, як це було показано неодноразово [1]. Для додаткового легування зазначеного матеріалу було обрано кобальт, оскільки добре відомо, що він здатен взаємодіяти з воднем, а також розчинятись у фазах Лавеса зазначеного типу. З метою встановлення впливу кобальту, було виплавлено раніше досліджений сплав $Ti_{15,4}Zr_{30,2}Mn_{44}V_{5,4}Cr_5$ [2] в якому було частково замінено марганець на 5 ат. % кобальту.

Методом скануючої електронної мікроскопії було встановлено, що тільки частина введено у сплав $Ti_{15,4}Zr_{30,2}Mn_{44}V_{5,4}Cr_5$ кобальту розчинилась у вихідній структурі, більша його частина з'єднавшись з іншими компонентами сплаву утворила нову фазу. За допомогою рентгенівського фазового аналізу було встановлено, що нова утворена фаза це кубічний інтерметалід типу Zr_2Co.

Процес взаємодії сплаву $Ti_{15,5}Zr_{30}Mn_{38}V_{5,5}Cr_{5,5}Co_{5,5}$ з воднем, досліджувався при тих же параметрах гідрування, що і для сплаву раніше дослідженого (кімнатна температура, тиск водню 0,23 МПа) для можливості коректного порівняння. Процес активного поглинання водню, при першому гідруванні, досліджуваним сплавом з кобальтом розпочався вже через одну хвилини (для сплаву взятого за основу [2], через дві) після контакту з водневмісним середовищем і продовжувався п'ять хвилин, при цьому воднева ємність склала 1,65 мас.%, тоді як для сплаву взятого за основу 2,12 мас.%. Подальша витримка у водні впродовж 35 хвилин, дозволяє збільшити кількість поглинутого водню до 1,86 мас.%. Зменшення загальної кількості поглинутого водню досліджуваним сплавом, можна пояснити присутністю другої фази. Процес виділення водню з продуктів гідрування отриманих при гідруванні досліджуваного сплаву, при початковому тиску $4 \cdot 10^{-3}$ Па, як і для сплаву взятого за основу, розпочинається з початком нагріву. При нагріванні до температури ≈ 430 °С вдалося виділити біля 95 % від загальної кількості поглинутої водню.

1. V.A. Dekhtyarenko, D.G. Savvakin, V.I. Bondarchuk, V.M. Shyvanyuk, T.V. Pryadko, and O.O. Stasiuk, *Prog. Phys. Met*. 22 (2021) 307-351. https://doi.org/10.15407/ufm.22.03.307

2. V.A. Dekhtyarenko *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 10: 1283 (2021). https://doi.org/10.15407/mfint.43.08.1053

Нові композитні матеріали на основі інтерметаліду типу AB_2 з магнієм для зберігання водню

Дехтяренко В.А.
Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, Київ, Україна
Тел.: +38 044 424 12 20 E-mail: Devova@i.ua

Авторами [1] показана перспективність застосування сплавів на основі фази Лавеса типу С14 (основний представник, сполука $TiMn_2$) в якості сорбенту для зберігання водню у зв'язаному стані,. Оскільки, вони здатні взаємодіяти з воднем при кімнатній температурі та з високою швидкістю. Проте, основною проблемою, що лімітує їх використання, є відносно низька кількість поглинутого водню (до 2 мас.%). На противагу цьому, магній має високу кількість поглинутого водню, але надскладний процес гідрування. Поєднання переваг кожного з цих матеріалів в композиті (оскільки дані матеріали не мають взаємної розчинності) має великі переваги для практичного використання в якості матеріалів для зберігання водню.

В якості вихідних матеріалів було взято порошок магнію розміром 100 мкм, та сплав $Ti_{15,5}Zr_{30}Mn_{5,5}V_{5,5}Cr_{5,5}Co_{5,5}$. Відповідно до даних рентгенівського фазового аналізу та скануючої електронної мікроскопії основою сплаву $Ti_{15,5}Zr_{30}Mn_{5,5}V_{5,5}Cr_{5,5}Co_{5,5}$ є фаза Лавеса типу С14 (об'ємна доля більше 80 %). Порошок сплаву було отримано двома методами. Механічним подрібненням (середній розмір порошку 500 мкм) та за допомогою водневого диспергування (розмір 30 мкм). Композитні матеріали отримувались за допомогою змішування порошків сплаву (або гідриду на його основі) та магнію (5; 10; 20 мас.%) впродовж 8 годин, з послідуючим пресуванням. Пресування дозволяє отримати високу контактну поверхню між порошками гідриду та магнію, а це у свою чергу, дозволяє полегшити процес насичення магнію воднем [1].

Процес взаємодії з воднем, спресованих композитів, проводився за такою методикою: у випадку використання порошку сплаву, спочатку насичувався воднем сплав при кімнатній температурі та тиску 0,23 МПа, після цього, тиск у реакторі знижувався до 0,0002 МПа та проводився нагрів до температури 400 °С (десорбція водню з гідриду на основі сплаву); у випадку використання гідриду на основі сплаву, одразу проводився нагрів до 400 °С. Даний нагрів дозволяв створити тиск водню в реакторі на рівні 0,1 МПа. Для кожного спресованого композиту проводилось по три цикли сорбція-десорбція.

Встановлено, що у випадку використання в якості вихідного матеріалу порошку сплаву, після першого насичення композиту воднем, відбувається його руйнування, що пов'язано з об'ємними ефектами які супроводжуються розчиненням водню. При використанні у якості вихідного матеріалу гідриду, спресований композит зберігав свою форму.

Методом рентгенівського фазового аналізу було встановлено, що після трьох циклів сорбція-десорбція у спресованому композиті окрім гідриду на основі сплаву та чистого магнію був присутні і гідрид магнію.

1. V.A. Dekhtyarenko, D.G. Savvakin, V.I. Bondarchuk, V.M. Shyvanyuk, T.V. Pryadko, and O.O. Stasiuk, $TiMn_2$-Based Intermetallic Alloys for Hydrogen Accumulation: Problems and Prospects, *Progress in Physics of Metals*, 22, No. 3: 307–351 (2021). https://doi.org/10.15407/ufm.22.03.307.

Аналіз впливу ультразвукової ударної обробки на структуру і механічні властивості алюмінієвих сплавів.

Гаценко О.С.[1(*)], Мордюк Б.М.[1], Турчак Т.В.[1], Баскова О.І.[1], Кушнарьова О.С.[2]

[1]*Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України*
[2]*Інститут електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України*
Тел.: +38 095 729 56 81 E-mail: gats@imp.kiev.ua

Численні дослідження впливу інтенсивної пластичної деформації на втому алюмінієвих сплавів свідчать про те, що існують кардинально різні фізичні механізми дисипації енергії при реалізації динамічних незрівноважених процесів за рахунок ударно-коливального навантаження. 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 [1].

Самоорганізація приводить до формування структури, яка сприяє деформаційному процесу, тому був проведений пошук експериментально доступних методів деформаційного впливу з метою збільшення втомної довговічності [2]. Виявилося, що для гетерогенних сплавів 2024-Т351 і D16CzAT імпульсне підвантаження (ударно-коливне навантаження — УКН) в процесі статичної деформації сприяє збільшенню подальшої втомної довговічності за певної величини деформації в процесі дії імпульсу.

Порівняльний аналіз втомної довговічності, та аналіз ТЕМ-зображень сплавів авіаційного сплаву 2024-Т3, що оброблявся УЗУО за двома режимами з різною інтенсивністю обробки та проведені нами раніше дослідження втомної довговічність авіаційних сплавів Д16 і 2024-Т3 після попереднього деформаційного оброблення статичною деформацією з імпульсним підвантаженням та УЗУО показали, що для сплаву 2024-Т3 втомна довговічність демонструє обернено пропорційну залежність від тривалості УЗУО. Це може результатом того, що вплив УЗУО на поверхню металу викликає пластичну деформацію поверхневого шару та зменшення розміру зерна, а шкідливі залишкові напруження розтягу ефективно усуваються, при цьому в приповерхневому шарі відбувається формування стискаючих напружень, які сприяють підвищенню мікротвердості та втомної міцності.

Також, було з’ясовано, що застосування складної комбінованої обробки, що включала ультразвукове ударне оброблення (УЗУО) після УКН не приводить до суттєвої зміни втомної довговічності сплаву 2024-Т351 в той час як одна УЗУО збільшує втомну довговічність стопу. З чого можна зробити висновок, що одночасне застосування комплексних деформаційних впливів сприяє пришвидшенню релаксаційних процесів, які зменшують втомну довговічність.

1. E. Zasimchuk, N. Chausov, T. Turchak, *Results in Materials*, **6**, (2020), 100090 https://doi.org/10.1016/j.rinma.2020.100090

2. O. E. Zasimchuk, M. G. Chausov, B. M. Mordyuk, O. I. Baskova, V. I. Zasimchuk, T. V. Turchak, and O. S. Gatsenko, *Progress in Physics of Metals*, **22**, 4, 619–642 (2021) http://dx.doi.org/10.15407/ufm.22.04.619

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ МІКРОСФЕР НА АБРАЗИВНУ ЗНОСОСТІЙКІСТЬ НАДВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛІЕТИЛЕНУ

Єрьоменко О.В., Граніцький Ю.Є.*, Томіна А.-М.В.

Дніпровський державний технічний університет, вул. Дніпробудівська, 2, Кам'янське 51918, Україна
**Тел.: +38 097 508 9241 E-mail: granickiy@gmail.com*

У зв'язку зі стрімким розвитком промисловості та підвищенням її конкурентоспроможності ростуть потреби в матеріалах з покращеними функціональними властивостями. Найбільш перспективними матеріалами, що задовольняють данні вимоги є полімерні композиційні матеріали (ПКМ).

Заміна традиційних металевих матеріалів на ПКМ забезпечує зниження матеріаломісткості деталей машин до 2,5 разів при збільшенні їх робочого ресурсу до 3 разів, зменшує трудомісткість виготовлення до 10 разів при скороченні часу на організацію виробництва деталі до 2,5 разів. Надійність деталей з ПКМ у 1,5 рази вища, ніж з традиційних матеріалів, що дозволяє успішно прогнозувати неухильне розширення їх використання в моделях транспорту майбутнього. Враховуючи це, було розроблено ПКМ на основі надвисокомолекулярного поліетилену (НВМПЕ) з використанням алюмосилікатних мікросфер.

Як полімерну матрицю для створення ПКМ обрали НВМПЕ (виробник Jiujiang Zhongke Xinxing New Material Co.,Ltd., Китай). Як наповнювач для полімерної матриці використовували алюмосилікатні мікросфери. Приготування ПКМ, що містять 10–50 мас.% наповнювача здійснювали методом компресійного пресування.

За результатами трибологічних досліджень встановлено, що абразивна зносостійкість ПКМ залежить від вмісту наповнювача і досягає максимального значення для композиту з вмістом 20 мас.% мікросфер. Це пояснюється зростанням міцності внаслідок високої адгезії між наповнювачем і полімерною матрицею. Однак, збільшення вмісту наповнювача понад 20 мас.% призводить до зниження пластичності композиту до критичного значення, що призводить до погіршення абразивної стійкості.

Слід також відзначити, що зі збільшенням шляху тертя абразивне зношування та шорсткість зменшуються. Це обумовлено тим, що поверхневий шар матеріалу піддається деформаційному зміцненню. Ще однією причиною явища, яке ми спостерігаємо, може бути засолення абразивної шкурки.

Розроблені матеріали на основі надвисокомолекулярного поліетилену та мікросфер можуть знайти своє застосування у різних галузях. Наприклад, вони можуть бути використані у промисловому насосному обладнанні, де насоси мають контакт з агресивними рідинами та абразивними матеріалами. Такі матеріали також можуть бути корисними в системах водопостачання та водовідведення, особливо в умовах з великою концентрацією абразивних часток.

УНІФІКОВАНИЙ АНАЛІЗ ТЕМПЕРАТУРНИХ ЗАЛЕЖНОСТЕЙ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ ВПОРЯДКОВАНИХ ТА РОЗУПОРЯДКОВАНИХ ТВЕРДИХ ТІЛ

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

Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Вєркіна НАН України, пр-т Науки, 47, Харків 61103, Україна
Тел.: +38 057 343 1400 E-mail:horbatenko@ilt.kharkov.ua

Теплопровідність матеріалів часто залежить від структури та типу впорядкування атомів в матеріалі. За характером температурних залежностей теплопровідності, їх умовно поділяють на кристалоподібні та склоподібні. Для кристалоподібної поведінки κ(T) характерною ознакою є наявність дзвоно-подібного максимуму теплопровідності в низькотемпературній області, після якого відразу ж спостерігається експоненціальне зменшення теплопровідності зі збільшенням температури, що плавно переходить в обернено-пропорційне зменшення теплопровідності. Зліва від максимуму теплопровідності температурні залежності κ(T) є пропорційними відповідно до різноманітних механізмів розсіяння на дефектах кристалічної ґратки матеріалу. Для невпорядкованих систем (аморфні, орієнтаційно невпорядковані кристали, скло тощо) теплопровідність демонструє склоподібну поведінку: її значення, як правило, низьке - коли температура підвищується від найнижчих температур, спочатку крива κ(T) показує квадратичну залежність від температури (від найнижчих температур і до ≈ 2 K), потім в діапазоні температур ≈ 5 ÷ 10 K виникає плато теплопровідності, після якого спостерігається зростання κ(T).

На прикладі речовин з клатратною структурою – газових гідратів, термоелектричних клатратів та скутерудитів [1] – проведено аналіз температурних залежностей теплопровідност з кристало- та склоподібною поведінкою κ(T). Показано, що обидва випадки можуть бути описані в рамках узагальненої теорії теплопровідності [2], зокрема, що в будь-якому твердому тілі теплотранспорт здійснюється двома шляхами – квазічастинковий теплоперенос та хвильове тунелювання коливальних збуджень.

1. A. I. Krivchikov, Y. V. Horbatenko, O. A. Korolyuk, O. O. Romantsova, O. O. Kryvchikov, D. Szewczyk, A. Jezowski, *направлена до друку в Acta Materialia*.
2. M. Simoncelli, N. Marzari, F. Mauri. *Nature Physics* **15**, No. 8: 809-813 (2019). DOI: https://doi.org/10.1038/s41567-019-0520-x.

Вдячність: Дана робота виконана за підтримки НФДУ в рамках проєкту “Квантове тунелювання коливальних збуджень в теплопровідності кристалічних та аморфних матеріалів і композитів” (реєстр. № 2020.02/0094).

ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ ЛОКАЛЬНОГО АТОМНОГО ВПОРЯДКУВАННЯ У БІНАРНИХ Co – Sn РОЗПЛАВАХ

Каширіна Я.О.(*), Муратов О.С., Казіміров В.П., Роїк О.С.
Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Хімічний факультет, 01601, вул. Володимирська, 64/13, м. Київ, Україна
**Тел.: +38 066 745-63-14 E-mail:* <yasya.loba@gmail.com>

Сплави на основі бінарної системи Co-Sn є перспективними для безсвинцевої пайки, нанесення гальванічних покриттів, а також для застосування у якості анодних матеріалів [1,2]. Сплави Co-Sn відносяться до систем для яких фазові перетворення потребують уточнення. Також важливим є розуміння процесів кристалізації із рідкого стану, що потребує детальної інформації щодо локального атомного впорядкування бінарних розплавів у широкій концентраційній області.

На сьогодні відсутні нейтронодифракційні або EXAFS дослідження Co-Sn розплавів, які дозволяють встановити парціальну атомну структуру безпосередньо із експериментальних дифракційних даних. Аналіз парціальної структури в основному ґрунтується на результатах комп'ютерного моделювання за допомогою метода Оберненого Монте-Карло [3,4].

Дана робота присвячена вивченню парціальної атомної структури розплавів Co-Sn у широкому концентраційному інтервалі при температурах поблизу ліквідусу з використанням Vienna ab-initio Simulation Package (VASP). Із отриманих структурних моделей розплавів були розраховані модельні структурні фактори, які демонструють непогане узгодження із експериментальними даними [4]. Було встановлено, що найкоротші найбільш імовірні відстані у бінарних розплавах реалізуються у парах Co-Co, Co-Sn. В той же час відстані у парах Sn-Sn близькі до тих, які мають місце у рідкому олові. Аналіз парціальних координаційних чисел та параметра Уорена-Коулі демонструє зміну знаку параметру при збільшенні вмісту Sn: при високому вмісті кобальту (≥ 86 ат.%) має місце переважна координація між різносортними атомами, а при вмісті кобальту менше 76 ат.% переважає координація між односортними атомами. Отримані дані корелюють із експериментальними термодинамічними та структурними дослідженнями Co-Sn розплавів [3-5].

1. H. Sun, Y. Tao, and J. Zhang, *Journal of Alloys and Compounds,* **84:** 156527 (2020). https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.156527
2. P. Giannozzi et al, *J. Phys.: Cond. Matter,* **29**, № 46: 465901 (2017). https:// doi:10.1088/1361-648X/aa8f79
3. A. Yakymovych, I. Shtablavyi, S. Mudry, *J. Alloys Compd*. **610**: 438-442 (2014). https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.05.020
4. V. Kazimirov, O. Roik, V. Sokolskii, *Rasplavy.* № 1: 13-21 (2008). https://doi.org/10.1134/S0036029510020011
5. A. Yakymovych, S. Fürtauer, H. Ipser, H. Flandorfer*, J. Chem. Thermodyn*. **74**: 269-285 (2014). http://dx.doi.org/10.1016/j.jct.2014.02.013

«Керамічні композити спрямовано армовані високоентропійними диборидами»

Кривенко К. В., Палагеча Д. Л., Богомол Ю.І.

Тел.: +38 093 410 7474 E-mail: kira.kryvenko@gmail.com
Тел.: +38 068 423 0340 E-mail: dimapalagecha2@gmail.com

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», проспект Перемоги 37, Україна

У сучасному світі швидкий розвиток породжує численні нові завдання, які можуть бути вирішені з розробкою нових матеріалів. Кераміка все більше стає альтернативою металевим матеріалам завдяки підвищеним механічним властивостям і стійкості до дії агресивних середовищ. Традиційні однофазні керамічні матеріали вже не задовільняють вимоги, тому створення нових керамічних композиційних матеріалів є актуальною задачею. Пропонується використовувати метод спрямованої кристалізації для отримання композиційних матеріалів з керамічною матрицею (B_4C або SiC) спрямовано армованою високоентропійними диборидами перехідних металів [1]. Метою даної роботи було дослідження структури та мікромеханічних властивостей спрямовано закристалізованих евтектичних сплавів систем SiC - (Ti, Zr, Hf, Nb, Ta)B_2 та B_4C - (Ti, Zr, Mo, Nb, Ta)B_2. В якості вихідних компонентів були взяті порошки карбідів бору та кремнію, диборидів титану, цирконію, гафнію, молібдену, ніобію і танталу. Зразки були отримані за допомогою установки «Кристал – 206» за швидкості вирощування: 1 - 4 мм/хв.

Дослідження мікроструктури показали, що мікроструктура отриманих матеріалів представляє собою матрицю з карбіду бору (для B_4C - (Ti, Zr, Mo, Nb, Ta)B_2) або карбіду кремнію (SiC - (Ti, Zr, Hf, Nb, Ta)B_2) спрямовано армовані однофазними високоентропійними диборидами (Ti, Zr, Mo, Nb, Ta)B_2 та (Ti, Zr, Hf, Nb, Ta)B_2, відповідно. Встановлено, що зі збільшенням швидкості вирощування кристалів поперечні розміри армуючої складової зменшуються. Аналіз фазового та хімічного складу отриманих композитів підтвердив дані металографічного аналізу.

Дослідженнями встановлено, що інтегральна мікротвердість отриманого композиту B_4C - (Ti, Zr, Mo, Nb, Ta)B_2 досягає 40 ГПа, а тріщиностійкість, оцінена за методикою індентування, складає 5,4 МПа $м^{1/2}$. Відповідно для композиту SiC - (Ti, Zr, Hf, Nb, Ta)B_2 отримано значення інтегральної мікротвердості на рівні 24 ГПа та тріщиностійкості 6,14 МПа $м^{1/2}$. Збільшення мікромеханічних властивостей в порівнянні з аналогічними композитами, отриманими без участі високоентропійних сплавів, можна пояснити, в першу чергу, твердорозчинним зміцненням, яке властиве високоентропійним диборидам перехідних металів [2].

1. W. J. Choyke, G. Pensl, Physical Properties of SiC, MRS Bulletin, No. 3: 22 (1997), P. 25–29.
2. Кисла Г. П., Лобода П. І., Федорчук В. Є., Матеріалознавство тугоплавких металів та сполук (Київ, Центр учбової літератури: 2017).

Chemical Deposition Techniques for Synthesizing High-Quality CdS/ZnS Heterostructures

Yana Sychikova*1, Sergii Kovachov[1] , Anatoli I. Popov[2]

[1] Berdyansk State Pedagogical University, Berdyansk, Ukraine
[2] Institute of Solid State PhysicsUniversity of Latvia, 8 Kengaraga str. LV-1063, Riga, Latvia
[*] +38 0663387864 E-mail: yanasuchikova@gmail.com

Over the past several years, cadmium-based semiconductors have garnered considerable attention due to their impressive properties, including tunable optical and electronic behaviors. These attributes make them ideal candidates for photovoltaic cells, light-emitting diodes (LEDs), and other optoelectronic devices. Cadmium sulfide (CdS), a direct-bandgap semiconductor, is one of this domain's most scrutinized thin-film materials [1, 2]. The efficacy of these films heavily relies on their crystallinity and orientation, criteria often met through vacuum deposition methods like evaporation, chemical vapor deposition (CVD), molecular beam epitaxy (MBE), and sputtering.

Despite their efficacy, vacuum methods present cost and technical complexity challenges. Conversely, chemical and electrochemical approaches offer a viable and economically efficient alternative, without compromising the material quality required for optoelectronic applications.

In this study, a three-step methodology was utilized to fabricate CdS films. Monocrystalline layers of zinc sulfide (ZnS) were employed as substrates. The first stage focused on the preparation of the ZnS substrates, followed by the deposition of a CdS thin film to form a CdS/ZnS heterostructure. The third stage involved annealing the resultant film to stabilize its properties and relieve surface stresses in the synthesized heterostructure.

Our comprehensive analysis, encompassing morphological, compositional, structural, and phase evaluations, confirms the high-quality nature of the heterostructure. Raman spectroscopy further substantiated a robust exciton-phonon coupling in the synthesized material. The presence of surface nanostructures and diverse compositional elements indicates complex interactions during the fabrication process, offering opportunities for material customization for specific applications. Importantly, our findings validate that chemical deposition methods can be scalable and cost-effective alternatives to vacuum methods for producing high-quality semiconductor films. Future investigations could focus on optimizing material properties for targeted applications in photovoltaic devices, LEDs, and other optoelectronic applications..

1. 1. Y. Chen, W. Zhong, F. Chen, P. Wang, J. Fan, and H. Yu, "Photoinduced self-stability mechanism of CdS photocatalyst: The dependence of photocorrosion and H2-evolution performance," Journal of Materials Science & Technology, vol. 121, pp. 19-27, 2022.
2. C. Jing, Y. Zhang, J. Zheng, S. Ge, J. Lin, D. Pan, et al., "In-situ constructing visible light CdS/Cd-MOF photocatalyst with enhanced photodegradation of methylene blue," Particuology, vol. 69, pp. 111-122, 2022.

Claim of discovery of a room-temperature superconductivity in copper-substituted lead apatite: a review

Sukhenko I.V.[1(*)]

[1]*Kurdyumov Institute of Metal Physics of the NAS of Ukraine, 36 Acad. Vernadsky Boulevard, Kyiv, Ukraine*
[*]*Tel: +380953988782 E-mail: igor.suhenko@gmail.com*

In July, 2023, a Korean research group claimed the achievement of room-temperature superconductivity in a material they called LK-99, $Pb_9Cu(PO_4)_6O$[1]. Resistivity and magnetization measurements that corroborated the claim were presented, as well as a recording of the levitation of a sample in magnetic field.

According to the authors, a Cu2+ atom acts as a hole dopant that bounds with $Pb^{(2)}$ atoms turning the material into metal with Pb 6s1 band responsible for the conduction. In the superconducting state, carriers of $Pb^{(2)}$(6s1) at nearest neighbor sites form a bi-polaron (this mechanism is also found in other high T_c- SC). The bi-polaron then tunnels along the apatite column. As the obtention of the room temperature SC would potentially bear enormous industrial implications, multiple research groups throughout the world have tried to replicate the result or conduct theoretical calculations of the LK-99 in order to verify the existence of superconducting state.

Some researchers were able to achieve some levitation in the magnetic field [2], but a similar effect can be observed in ferromagnetic materials under certain conditions and is called pseudo-levitation. Hou et al. has managed to obtain zero resistance in LK-99 around 100K. However, other attempts were not successful. Ferromagnetic and paramagnetic phases were also found [2]. Kumar et al., on the other hand, reports a diamagnetic behaviour [3].

According to quantum mechanical calculations, the introduction of Cu causes structural distortions in the lattice that facilitate the formation of an isolated set of extremely flat Cu 3d bands with half-filling [4]. Flat bands lead to strong electron-electron interactions that may provoke superconductivity, but also other phenomena like ferromagnetism. Calculations also showed that $Pb^{(2)}$ position was more energetically favorable for the copper substitution, however it is the $Pb^{(1)}$ position that lead to flat bands. This conclusion might explain the inconsistency in results and inability to replicate superconductivity.

1. Sukbae Lee, Ji-Hoon Kim, Young-Wan Kwon: “The First Room-Temperature Ambient-Pressure Superconductor”, 2023; arXiv:2307.12008.
2. Kaizhen Guo, Yuan Li, Shuang Jia: “Ferromagnetic half levitation of LK-99-like synthetic samples”, 2023; arXiv:2308.03110.
3. Kapil Kumar, N. K. Karn, Yogesh Kumar, V. P. S. Awana: “Absence of superconductivity in LK-99 at ambient conditions”, 2023; arXiv:2308.03544.
4. Sinéad M. Griffin: “Origin of correlated isolated flat bands in copper-substituted lead phosphate apatite”, 2023; arXiv:2307.16892

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ТИГЕЛЬНОГО ГРАФІТУ НА ПОКАЗНИК АБРАЗИВНОГО СТИРАННЯ НАДВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛІЕТИЛЕНУ

Єрьоменко О.В., Томін С.В.*, Єрьоміна К.А.

Дніпровський державний технічний університет, вул. Дніпробудівська, 2, Кам'янське 51918, Україна
**Тел.: +38 097 508 9241 E-mail: svatoslavtomin@gmail.com*

Зношування та механічне пошкодження робочих органів техніки, це найбільш розповсюджена причина аварійних зупинок виробництва, близько 80 % яких пов'язані зі зовнішнім абразивним впливом. В процесі експлуатації робочі органи автомобільної, гірничорудної, ґрунтообробної, текстильної та посівної техніки, взаємодіючі з твердими частками (глиноземом, піском і гірськими породами), зазнають дряпаючого та різального впливу, внаслідок чого відбувається механічне руйнування поверхонь тертя – абразивне зношування. Одним із технологічних методів рішення даної проблеми є використання полімерних композитів натомість традиційним металам та сплавам. Враховуючи зазначене, дана робота присвячена розробці та дослідженню нових полімерних композитів із низьким показником абразивного стирання.

Як полімерну матрицю для створення зносостійких полімерних композитів обрали надвисокомолекулярний поліетилен (НВМПЕ). Як наповнювач для НВМПЕ обрали тигельний графіт – природний кристалічний графіт, отриманий шляхом збагачення графітових руд. Приготування графітопластів (ГП) на основі НВМПЕ, що містять 10–50 мас.% тигельного графіту здійснювали методом компресійного пресування.

За результатами досліджень функціональних властивостей встановлено, що введення тигельного графіту в кількості 10-50 мас.% призводить до зменшення показника абразивного стирання надвисокомолекулярного поліетилену на 20-35 %, сягаючи мінімальних значень при кількості наповнювачі 30 мас.%. Дані результати підкорюються закономірності Ратнера – збільшення твердості НВМПЕ на 17%, по мірі збільшення кількості тигельного графіту, призводить до загального збільшення зносостійкості ГП. Введення графіту понад 30 мас.% призводить до падіння показника абразивного стирання та твердості, що, імовірно, обумовлено зростанням дефектів в об'ємі НВМПЕ. З отриманих мікроструктур НВМПЕ та ГП на його основі можна зробити висновок про те, що введення ТГ посилює полімерну матрицю, в результаті чого, відбувається зростання опору поверхонь тертя ГП до механічного руйнування (шорсткість поверхні тертя зменшилася на 35%). Аналіз результатів функціональних характеристик розроблених ГП показав, що використання тигельного графіту як наповнювача для надвисокомолекулярного поліетилену, є перспективним шляхом зменшення його показника абразивного стирання на 35 % й підвищення твердості на 17 %.

ДЕГРАДАЦІЯ СПЛАВУ TI6AL4V ПРИ ПОВТОРНОМУ ВИКОРИСТАННІ В ПРОЦЕЦІ 3Д-ДРУКУ

Єфіменко М.Ю.[1(*)], Чернета З.Є.[2], Богомол Ю.І.[1]

[1] НТУУ "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського" Україна, 03056, м.Київ-56, Берестейський проспект (Перемоги), 37, Україна.
[*]Тел.: +38 0933638419 -mail: maks.efimenko.9925@gmail.com

Для сучасного виробництва та його багаторазового використання сплав Ti6Al4V має важливе значення, що робить обов'язковим вивчення його властивостей деградації під час 3D-друку.

За допомогою SEM-аналізу було виміряно розмір порошку Ti6Al4V до та після друку з різними циклами використання. Для вивчення структури порошку використовували SEM-зображення. Механічні властивості оцінювали через розрив зразка, виявляючи зміни міцності та пластичності сплаву з кожним наступним використанням. Початкове використання показало твердість надрукованого зразка HRC = 32,15-33,72. Після багаторазового використання порошку можна було виявити частинки різного розміру через зміни гранулометричного складу. Крім того, вивчення фрактографії руйнування зразка після використання дозволило ідентифікувати напружені зони та дефекти матеріалу. Проведено аналіз хімічного складу сплаву для визначення можливих змін у концентрації легуючих елементів після кількох циклів використання порошку.

На основі отриманих даних було виявлено оптимальну кількість циклів використання порошку Ti6Al4V під час 3D-друку. Дослідження дозволило зрозуміти залежність між кількістю циклів використання порошку та його фізико-хімічними характеристиками, що є важливим для подальшого вдосконалення процесів 3D-друку з використанням даного сплаву.

БІОМАТЕРІАЛИ ТА БІОНАНОТЕХНОЛОГІЇ

Ефект наведеної надпровідності сплавом MoRe у Ni.

Мартиненко І.О. [1] , **Каленюк О.А.**[1,2] **Шаповалов А.П.**[1,2]

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

[2]*Київський академічний університет бульвар ак. Вернадського, 36, 03142, Київ*

**Тел.: +38 0638928286 E-mail: i.martynenko@kau.edu.ua*

В роботі приведені результати дослідження вольт-амперних характеристик (ВАХ) контакту типу надпровідний сплав – нормальний магнітний метал MoRe-Ni (S-N). ВАХ були отримані 4-х точковим методом (вставка на рис. 1. а)). Магнітні метали часто використовують в якості нормального провідника для уникнення небажаного ефекту наведеної надпровідності у андрійовському відбитті. Феромагнетик Ni має спін-орієнтовані (поляризовані) електрони з показником поляризації 35%. Тобто показник наведеної надпровідності у Ni має бути незначним. Але у проведені дослідження двох контактів, які відрізняються між собою ступеню притискання голки, показали наявність критичного струму, що досягав 0,52 мА для більш притиснутого контакту при температурі 4,2К (рис. 1).

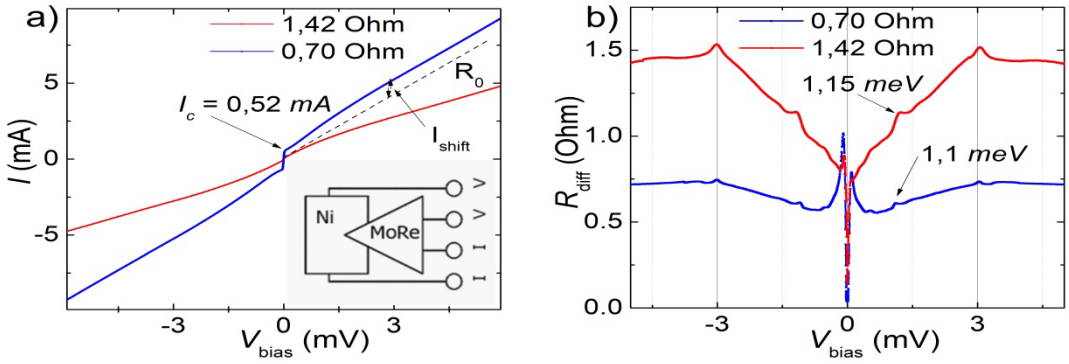


Рис. 1. Пряма а) та диференційна b) ВАХ контакту типу S-N (MoRe-Ni), із різним показником постійного опору на контакті, вставка на а) схема 4-х точкового підключення зразка;

Застосовуючи теорію БКТ ($\Delta = \frac{4}{3} R_0 I_{shift}$) були знайдені значення надпровідної щилини Δ=1,07 *меВ*. Це значення також відповідає піку диференційного опору на диференційній кривій рис. 1 б). В свою чергу отримане значення енергетичної щілини не відповідає іншим типовим значенням Δ=1,65-2,25 *меВ* для сплаву MoRe. Наявність наведеної надпровідності в Ni у контакті MoRe-Ni а також відміності у отриманому значенні надпровідної щілини може свідчити про відміну від класичного синглетного *s*-спарювання симетрію параметру порядку у надпровідному сплаві MoRe. Ця робота частково підтримувалася в рамках проекту 2020.02/0408, що фінансується Національним фондом досліджень України.

МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ МАТЕРІАЛІВ

НОВИЙ МЕТОД ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ МАТЕРІАЛІВ: FESUMA

Безгуба В.В.[1,2(*)], **Плющай О.І.**[1,2], **Кордюк О.А.**[1,2]

[1]*Київський академічний університет, бульвар Акад. Вернадського, 36, 03142, Київ, Україна*
[2]*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, бульвар Академіка Вернадського, 36, 03142, Київ, Україна*
[*]*Тел.: +38 067 890 7015 E-mail: v.bezguba@kau.edu.ua*

Властивості матеріалів значною мірою залежать від їхньої електронної структури. Фотоелектронна спектроскопія з кутовим розділенням (angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES) є саме тим методом, що дозволяє «безпосередньо» спостерігати її в експерименті. Без ARPES-у неможливо уявити сучасні дослідження квантових матеріалів, таких як високотемпературні надпровідники, топологічних напівметалів, топологічних ізоляторів, тощо.

Одним із обмежень даного методу є те, що для отримання Фермі мапи необхідно проводити декілька окремих вимірів, під час яких параметри експерименту можуть зазнавати незначних змін та спотворювати фінальний спектр. Ці проблеми вирішує новий тип ARPES спектрометру FeSuMa (Fermi surface mapper), котрий дозволяє отримати Фермі мапу за одне вимірювання[1]. Саме на основі цього спектрометру зараз іде активна робота по створенню ARPES-лабораторії в КАУ.

Незважаючи на свою новизну, на сьогодні уже існує ряд публікацій, котрі використовують дані отримані в експериментах з використанням FeSuMa. Так, було показано, що BiTeI є топологічним Діраківським напівметалом[2]. Також здатність FeSuMa швидко отримувати всю Фермі мапу робить цей метод ідеальним для високоякісних вимірювань ARPES з часовим розділенням (time-resolved ARPES) та дозволяє бачити валентні стани та стани провідності біля Фермі рівня[3].

1. S. Borisenko, A. Fedorov, A. Kuibarov, M. Bianchi, V. Bezguba, P. Majchrzak, P. Hofmann, P. Baumgärtel, V. Voroshnin, Y. Kushnirenko, J. Sánchez-Barriga, A. Varykhalov, R. Ovsyannikov, I. Morozov, S. Aswartham, O. Feia, L. Harnagea, S. Wurmehl, A. Kordyuk, A. Yaresko, H. Berger, & B. Büchner, Fermi surface tomography, Nature Communications, 13(1), 4132 (2022).
2. A. Kuibarov, A. Fedorov, V. Bezguba, H. Berger, A. Yaresko, V. Voroshnin, A. Kordyuk, P. Baumgärtel, B. Büchner, & S. Borisenko, Isolated fourfold fermion in BiTeI, Phys. Rev. B 105, 235112 (2022).
3. P. Majchrzak, Y. Zhang, A. Kuibarov, R. Chapman, A. Wyatt, E. Springate, S. Borisenko, B. Büchner, P. Hofmann, and & C. E. Sanders, Access to the full 3D Brillouin zone with time resolution, using a new tool for pump-probe ARPES, arXiv preprint arXiv:2309.11535 (2023).

Вимірювання коефіцієнту теплопровідності плівки AlN методом 3ω

Бурлаков В.О.[(*)], **Полоцький Д. Ю., Короташ І. В., Руденко Е. М., Філатов О.В.**[1]

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

[*]*Тел.: +380935671384 E-mail: odinpwnzpacan@gmail.com*

У міру зменшення розміру функціональних елементів сучасних електронних пристроїв, виділення тепла на одиницю площі в них значно збільшується. Для ефективного контролю генерації тепла елементами необхідно точно знати теплопровідність його матеріалів. Однак теплопровідність плівкових елементів суттєво залежить від технології їх отримання та різко змінюється, коли хоч один розмір плівкового елементу наближається до довжини вільного пробігу фононів. Відпрацювання і удосконалення методики дослідження теплопровідності плівкових матеріалів та пошук матеріалів з високим коефіцієнтом теплопровідності є ключем до вирішення даної проблеми.

Метод 3ω — це частотно-залежний метод контактної термометрії, який використовує не пряме вимірювання температури, а опосередковане, за генерацією напруги нагрівачем на третій гармоніці частоти струму нагріву. Для цього на досліджуваній плівці формується вузька металева смужка нагрівача, через яку пропускається змінний струм різної частоти. Зміна температури нагрівача обумовлюється теплообміном з досліджуваною плівкою, тоді як теплообмін з навколишнім середовищем вважається суттєво низьким. Фізичний зміст процесу полягає в тому, що під час протікання струму через металеву смужку остання гріється і її опір зростає. Оскільки смужка нанесена на поверхню зразка, то частина тепла переходить від смужки до зразка в процесі теплообміну. Кількість тепла, відданого смужкою за різної частоти струму, пропорційна падінню напруги на третій гармоніці. Розв'язавши рівняння теплопровідності даної системи, можна розрахувати значення коефіцієнта теплопровідності досліджуваної плівки.

Коефіцієнт теплопровідності плівки нітриду алюмінію (AlN) визначався для зразків товщиною 1–3 мкм які були синтезовані на підкладинках монокристалічного кремнію. На поверхні плівки AlN методом фотолітографії формувалась смужка нагрівача Al розміром 280×70 мкм та товщиною до 0,1 мкм. Температурний коефіцієнт опору α нагрівача вимірювався чотирьохзондовою методикою в тепловій шафі в діапазоні температур 292-372 К – $\alpha = 0{,}48\times10^{-3}$ $К^{-1}$. Вимірювання падіння напруги на третій гармоніці проводилось при підключені зразка в місток Уінстона з плечами R_1=50 Ом та R_2=2 кОм, шо забезпечувало протікання струму переважно через зразок, та в діапазоні частоти змінного струму 75-750 Гц. В результаті встановлено, що коефіцієнт теплопровідности λ плівки нітриду алюмінію на підкладинці з монокристалічного кремнію складає λ=67,5 Вт/м·К. Отримані результати корелюють з результатами попередніх досліджень [1].

1. E. M. Rudenko, A. O. Krakovnyy, M. V. Dyakin, I. V. Korotash, D. Yu. Polots'kyy, and M. A. Skoryk, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 8: 989–1002 (2022) (in Ukrainian). DOI: 10.15407/mfint.44.08.0989

ТЕХНОЛОГІЇ СИНТЕЗУ ТА МОДИФІКУВАННЯ МАТЕРІАЛІВ

Electrochemical Etching of p-type GaAs: Microscale Oxidation Mechanisms

Sergii Kovachov[1], Yana Sychikova*[1],Anatoli I. Popov[2]

[1] Berdyansk State Pedagogical University, Berdyansk, Ukraine

[2] Institute of Solid State PhysicsUniversity of Latvia, 8 Kengaraga str. LV-1063, Riga, Latvia

** +38 0663387864 E-mail: yanasuchikova@gmail.com*

With the increasing prominence of optoelectronic devices, Gallium Arsenide (GaAs) has gained significant attention as a III-V semiconductor material due to its noteworthy electronic mobility, energy efficiency, high breakdown field, and direct bandgap [1,2]. In this research, we employ a sophisticated binary electrochemical etching approach to investigate the nuanced surface texture alterations occurring during the etching of p-type GaAs using a $HF:C_2H_5OH:H_2O$ electrolytic solution. During the etching process, we observe the distinct formation of micron-sized oxide precipitates of arsenic trioxide (As_2O_3), gallium oxide (Ga_2O_3), and gallium arsenate ($GaAsO_4$) on the GaAs surface under specific etching conditions. These transformations from microcrystalline structures to micro-needles are discussed and rationalized through the lens of anodic degradation and oxidative phenomena in GaAs materials. The oxide formations on the GaAs surface pave the way for fabricating composite oxide/GaAs structures with heterojunctions, creating new avenues for optoelectronic advancements.

The emergence of diverse oxide forms (Ga_2O_3, As_2O_3, $GaAsO_4$) results from oxidation reactions with potent oxidants like ethanol. However, these oxide compounds exhibit varying levels of stability and eventually convert to Ga_2O_3 over extended etching intervals.

1. 1. B. Wei, X. Mao, W. Liu, C. Ji, G. Yang, Y. Bao, ..., and X. Wang, "Recent Progress of Surface Plasmon–Enhanced Light Trapping in GaAs Thin-Film Solar Cells," Plasmonics, pp. 1-21, 2023.

2. H. Carfagno, M. A. Guidry, J. Yang, L. McCabe, J. M. Zide, J. Vučković, and M. F. Doty, "Inverse Designed Couplers for Use in Gallium Arsenide Photonics," ACS Photonics, vol. 10, no. 5, pp. 1286-1292, 2023.

ВІДБИТТЯ ПОВІЛЬНИХ ЕЛЕКТРОНІВ ВІД ПОВЕРХНІ ГРАНЕЙ (110) ТА (100) ВОЛЬФРАМУ ПРИ АДСОРБЦІЇ ЦЕЗІЮ

Смольнік С.В.[1,*], Шевченко М.Я.[1], Галстян І.Є.[1], Михайлова Г.Ю.[1], Лень Є.Г.[1,2]

[1]Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, бульв. Академіка Вернадського, 36, 03142, Київ, Україна
[2]Київський Академічний Університет НАН та МОН України, бульв. Академіка Вернадського, 36, 03142, Київ, Україна
[*]Тел.: +38 093 763 2535 E-mail: sviatsmol@gmail.com

Основні завдання емісійної електроніки та її проблеми пов'язані з необхідністю покращення емісійних властивостей електродів, зокрема для термоемісійних перетворювачів (ТЕП). Одним з напрямів підвищення ефективності прямого перетворення теплової енергії на електричну є зменшення зворотного струму з аноду на катод шляхом зменшення коефіцієнту відбиття електронів ($K_{відб}$) на аноді, зокрема завдяки адсорбції на його поверхні цезію. Стан поверхонь електродів ТЕП істотно впливає на вихідні характеристики ТЕП та їх стабільність. В реальних умовах роботи ТЕП найбільший вплив мають газові домішки (водень, кисень) та домішка вуглецю, що найбільш важко видаляється. Вуглець в процесі роботи приладу може перерозподілятися в об'ємі електродів і накопичуватися на їх поверхні, впливаючи на параметри адсорбції цезію та, з іншого боку, на параметри випаровування матеріалу. Все це позначається на ефективності та ресурсі ТЕП.

У роботі [1] методом контактної різниці потенціалів було досліджено залежність роботи виходу електронів (φ) та теплоти адсорбції від концентрації (n) цезію на атомно-чистій та забрудненій вуглецем грані (110) вольфраму. Стан поверхні контролювали шляхом зняття спектрів повного струму (СПС). Було показано, що вуглець погіршує адсорбційну взаємодію цезію з поверхнею, що призводить до погіршення вихідних характеристик ТЕП при застосуванні зазначеної грані як емітера. Відомо, що для отримання значної потужності ТЕП оптимальна робота виходу емітера має становити 2,3–2,8 еВ, а колектора — 1–1,7 еВ за мінімального відбиття електронів від поверхні останнього.

Нами досліджено зміну відбиття повільних (1–2 еВ) електронів при адсорбції цезію на атомно-чистих поверхнях W(110) та W(100). Для грані W(110) (φ = 5,3 еВ) коефіцієнт $K_{відб}$ зменшується від 0,45 для чистої поверхні до 0,26 при формуванні моношару з атомів Cs (n = 5,5·10^{14} ат/см^2). Для грані W(100) (φ = 4,65 еВ), навпаки, $K_{відб}$ збільшується від значення 0,08 для чистої поверхні до того ж значення у 0,26 за появи моношару адсорбованого Cs.

Показано, що для грані W(110) при оптимальних значеннях φ (2,3–2,8 еВ), які досягаються за n = (1,4–1,6)·10^{14} ат/см^2, коефіцієнт $K_{відб}$ набуває найменшого значення ~ 0,22. Мінімальне значення φ =1,4 еВ для цієї грані отримано при n = 3,6·10^{14} ат/см^2, а $K_{відб}$ при цьому дорівнює 0,25.

1. Б. П. Вараксин, А. С. Титков, В. И. Силантьев, Н. А. Шевченко, *Поверхность*, № 11: 125-131 (1991).

Модифікація електронної структури кальцієвих апатитів шляхом ізоморфних заміщень

Сухенко І.В.[1(*)], Карбівський В.Л.[1]

[1]Інститут металофізики імені Г. В. Курдюмова НАН України, бульвар Академіка Вернадського, 36, Київ, Україна
[*]Тел.: +380953988782 E-mail: igor.suhenko@gmail.com

Розширення фізичних властивостей апатитів, так само як і інших сполук, багато в чому визначається ізоморфними заміщеннями. Вивчення при цьому специфіки хімічних зв'язків та похідних від них фізичних властивостей апатитоподібних сполук являється важливою задачею [1].

Був проаналізований вплив ізоморфних заміщень у катіонній та аніонних підгратках гідроксоапатиту кальцію на структуру валентної зони, величину забороненої зони та структуру хімічних зв'язків. Були проведені виміри фотоелектронних спектрів, а також квантовомеханічні обчислення за допомогою теорії функціоналу щільності.

Заміщення йонів кальцію йонами важких металів мало змінює форму кривої зайнятої частини валентної смуги, яка зберігає виражений зонний характер з різною протяжністю окремих підсмуг. Встановлено переважне входження атомів РЗМ та урану в $Ca^{(2)}$-позицію структури апатиту. Виявлено особливість електронної будови $Pb_{10}(PO_4)_6(OH)_2$: можлива участь у зв'язку неподільної пари $6s^2$ атомів $Pb^{(2)}$.

Ізоморфне заміщення в структурі апатиту атомів кальцію на атоми металів (Fe, Ni, Cu, Mg) у межах 1-2 ат.% приводить до звуження енергетичної щілини. Найбільш суттєве звуження спостерігається при заміщенні нікелем та міддю. Заміщення атомів кальцію атомами 3d металів в структурі кальцієвого апатиту призводить до незначного зменшення взаємодії Me-O у порівнянні зі стехіометричним зразком.

Для апатитів ряду $Ca_{10}(PO_4)6X_2$, де X = F, Cl, Br, OH спостерігаються суттєві зміни у йонному заряді кисню для різних нерівноцінних позицій, при тому йон $O^{(2)}$ володіє найбільшим зарядом, а $O^{(3)}$ – найменшим. Середній заряд йону фосфору становить приблизно +3.66 заряду електрона, що свідчить про сильний віттік електронного заряду з атомів фосфору на атоми кисню. Для кальцієвого хлороапатиту область поблизу рівня Фермі формується, головним чином, O 2p, та Cl 3p станами. Для атомів фосфору зафіксовано аномальний розподіл електронної густини для незайнятої частини валентної смуги, що формується переважно P 3p станами.

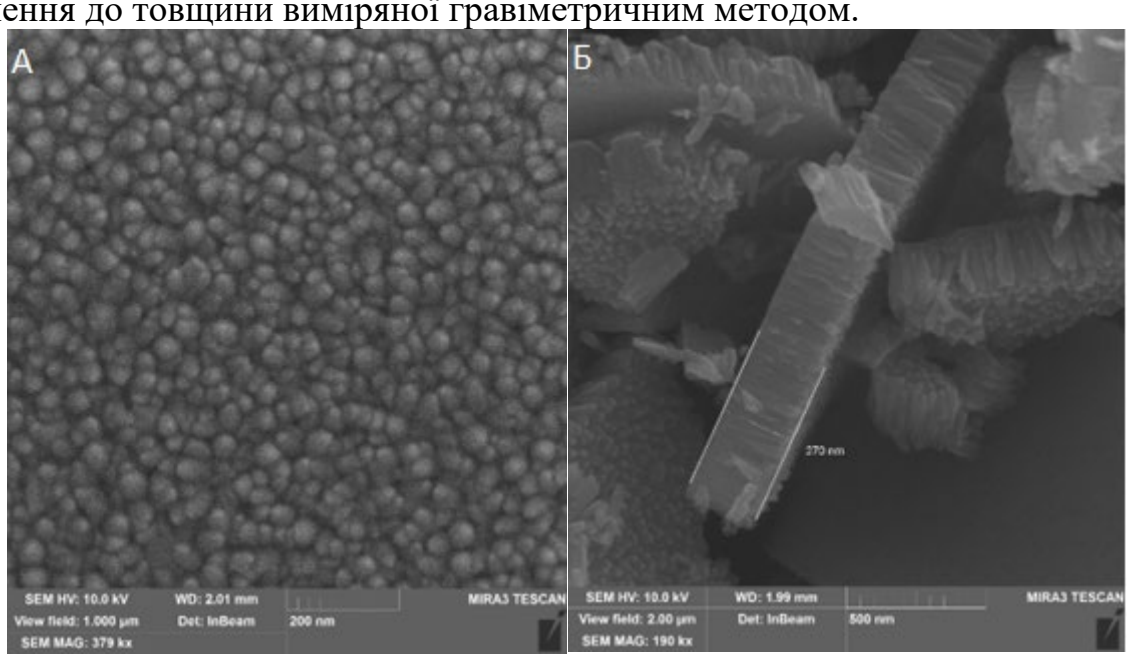
1. L.I. Karbivska, V.L. Karbivskii. Apatites and tetraoxide compounds. Kyiv, Akademperiodyka, "Ukrainian scientific book in a foreign language", 2019. 232 p.

Радіочастотне нанесення наноструктурованих тонких плівок цинк оксиду

Заіка В.В., Швачко Н.К., Карбівський ВЛ.
Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, 03680 бульвар академіка Вернадського 36, Київ, Україна.
Тел.: +38 068 774 7932 E-mail: zaikavladimir228@gmail.com

Останнім часом тонкі плівки цинк оксиду превертають значну увагу дослідників та інженерів, в зв'язку з унікальним комплексом їх властивостей, а саме широку заборонену зону 3.37еВ, гарну оптичну прозорість у видимуму діапазоні та незначний електричний опір. Таким чином тонкі плівки цинк оксиду являються перспективним кандидатом для застосування в якості прозорого провідного електроду для сонячних елементів.

За допомогою радіочастотного магнетронного нанесення нами було отримано тонкі плівки цинк оксиду на склі для мікроскопу. Товщина плівки становила 280±24нм, яка була визначена за допомогою гравіметричного методу. На рис. А зображено знімок поверхні отриманий за допомогою скануючого електронного мікроскопу. З наведеного рисунку випливає що плівки являються достатньо однорідними з середнім розміром нанозерна≈20нм. Враховуючи, що під час магнетронного нанесення зразок нагрівається, пілся чого за рахунок не рівномірного охолодження із-за різних коефіцієнтів термічного розширення утворюється напруження на границі розділу плівка/скло що може руйнувати плівку(рис Б). Цікаво, що частина плівки яка зазнала руйнування має товщину 270нм, що має близьке значення до товщини виміряної гравіметричним методом.



А) зображення характерної області поверхні.Б) Частини плівки зруйнована внаслідку напруги на границі плівки ZnO/скло.

ОДЕРЖАННЯ ЕНДОФУЛЛЕРЕНІВ ЗАЛІЗА

Золотаренко Ол.Д. [1,2], **Золотаренко Ан.Д.**[1,2], **Аханова Н.Е.** [3,4], **Уалханова М.**[4], **Щур Д.В.**[1,5], **Габдуллін М.Т.**[4], **Тарасенко Ю.О.**[1], **Рудакова О.П.** [1], **Золотаренко О.Д.**[1], **Чимбай М.В.**[1], **Загорулько І.В.**[6]

[1] *Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, вул. Генерала Наумова, 17, Київ 03164, Україна*
[2] *Інститут проблем матеріалознавства імені І.М. Францевича НАН України, вул. Кржижановського 3, Київ 03142, Україна*
[3] *Казахської-британський технічний університет (КБТУ) пр. аль-Фарабі, 71, Алмати 050040, Казахстан*
[4] *Національна нанотехнологічна лабораторія, КазНУ ім. Аль-Фарабі пр. аль-Фарабі, 71, Алмати 050040, Казахстан*
[5] *Інститут прикладної фізики НАН України, вул. Петропавлівська, 58, Суми 4000, Україна*
[6] *Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, бульв. Академіка Вернадського 36, Київ 03142, Україна*
[*] *Тел.: +38 974452983 E-mail: o.d.zolotarenko@gmail.com*

У оглядовому матеріалі описані основні досягнення в галузі одержання ендофуллеренів заліза, де атом або група атомів металу знаходяться всередині фуллеренової молекули (МЕФ). З огляду можна зробити висновок, що отримання ендофуллеренів малоактивних d-металів, і зокрема заліза, виявилося досить малоефективним, незважаючи на численні спроби багатьох дослідників. Є думка, що існує експоненційне зменшення виходу МЕФ зі збільшенням номера групи табл. Д.І. Менделєєва, в якій знаходиться метал.

Тим не менш, Fe-ендофуллерени все ж таки отримують, просто з дуже незначними виходами і великими труднощами при їх виділенні з суміші продуктів, оскільки не забезпечується повнота вилучення ендофулеренів з синтезованої сажі (розчинність фуллеренів в толуолі не перевищує 2 мг/мл).

Отримують залізо-ендофулерени в основному двома традиційними методами: у плазмі, що створюється електродуговим способом, або із застосуванням лазера (методи абляції та імплантації). Акцентуємо нашу увагу на очевидній залежності виходу цих МЕФ від температури плазми (насамперед у процесах залучення атомів заліза в молекулу фуллерену, що формується). Можна відзначити наявність у реакційному середовищі газів, які не утворюють комплексів із фуллеренами; та ймовірну залежність від хімічної природи прекурсора атомів заліза. Дослідження вказують на якісний синтез ендофуллеренів заліза в електродуговому синтезі при застосуванні піролізату фталоціаніну заліза, а не оксидів заліза або його пентакарбонілу.

Інтерес дослідників до МЕФ заліза визначається наявністю у них магнітних властивостей за рахунок атомів заліза та можливістю їх застосування в якості контрастних речовин у МРТ, які можуть знайти багатообіцяючі застосування у клінічній діагностиці, а також для магнітокерованої доставки лікарських препаратів до хворого органу.

СИНТЕЗ ПЛАТИНОВМІСНИХ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОСТРУКТУР, ЯК НАПОВНЮВАЧІВ КЕРАМІЧНОЇ МАТРИЦІ ДЛЯ 3D ДРУКУ ТЕХНОЛОГІЇ CJP

Золотаренко Ол.Д. [1,2], **Золотаренко Ан.Д.**[1,2], **Аханова Н.Е.** [3,4], **Уалханова М.**[4], **Щур Д.В.**[1,5], **Габдуллін М.Т.**[4], **Тарасенко Ю.О.**[1], **Рудакова О.П.** [1], **Золотаренко О.Д.**[1], **Чимбай М.В.**[1], **Загорулько І.В.**[6]

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

[2] *Інститут проблем матеріалознавства імені І.М. Францевича НАН України, вул. Кржижановського 3, Київ 03142, Україна*

[3] *Казахської-британський технічний університет (КБТУ) пр. аль-Фарабі, 71, Алмати 050040, Казахстан*

[4] *Національна нанотехнологічна лабораторія, КазНУ ім. Аль-Фарабі пр. аль-Фарабі, 71, Алмати 050040, Казахстан*

[5] *Інститут прикладної фізики НАН України, вул. Петропавлівська, 58, Суми 4000, Україна*

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

**Тел.: +38 974452983 E-mail: o.d.zolotarenko@gmail.com*

Ми пропонуємо створити вуглецеві наноструктури (ВНС), що містять платину, та використовувати їх для виготовлення паливних елементів (ПЕ). Це дозволить звести вміст Pt у ПЕ до мінімуму, а система технології 3D друку CJP дозволить ще більше зменшити їх собівартість.

Для вивчення придатності платиновмісних ВНС для 3D-друку технологією CJP (друк керамікою) було:

1. Встановлено, що для використання платиновмісної пристінної сажі необхідно проводити попередню недовгу обробку, а саме – подрібнювати у спеціальних «кульових млинах» або протирати крізь дрібне сито з мінімальними зусиллями для створення однорідності продукту. Попередні дослідження показали, що такі платиновмісні вуглецеві наноструктури вже можна використовувати у технології 3D друку CJP, або для створення нових композитів для технології 3D друку FDM, SLA.

2. Встановлено, що використання депозиту та його складових будови у створенні паливної комірки не дали значних результатів на відміну від пристінної сажі. Ми вважаємо, що це пов'язано з малим вмістом платинового (Pt) каталізатору у депозиті.

3. Встановлено, що процес подрібнення депозиту у спеціальному «кульовому млині» або його протирання крізь дрібне сито потребувало значних зусиль та часу роботи для створення однорідного стану продукту.

4. Встановлено, що дослідження даної науково-дослідної роботи дозволили створити не тільки керамічні електроди а й паливні комірки для паливного елементу водневого циклу без нанесення шару платинового (Pt) каталізатору при використанні технології 3D друку CJP.

ВПЛИВ МАРКИ ГРАФІТУ НА ПЛАЗМОХІМІЧНИЙ МЕТОД СИНТЕЗУ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОСТРУКТУР

Золотаренко Ол.Д. [1,2], **Золотаренко Ан.Д.**[1,2], **Аханова Н.Е.** [3,4], **Уалханова М.**[4], **Щур Д.В.**[1,5], **Габдуллін М.Т.**[4], **Тарасенко Ю.О.**[1], **Рудакова О.П.** [1], **Золотаренко О.Д.**[1], **Чимбай М.В.**[1], **Загорулько І.В.**[6]

[1] *Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, вул. Генерала Наумова, 17, Київ 03164, Україна*
[2] *Інститут проблем матеріалознавства імені І.М. Францевича НАН України, вул. Кржижановського 3, Київ 03142, Україна*
[3] *Казахської-британський технічний університет (КБТУ) пр. аль-Фарабі, 71, Алмати 050040, Казахстан*
[4] *Національна нанотехнологічна лабораторія, КазНУ ім. Аль-Фарабі пр. аль-Фарабі, 71, Алмати 050040, Казахстан*
[5] *Інститут прикладної фізики НАН України, вул. Петропавлівська, 58, Суми 4000, Україна*
[6] *Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, бульв. Академіка Вернадського 36, Київ 03142, Україна*
**Тел.: +38 974452983 E-mail: o.d.zolotarenko@gmail.com*

За результатами проведеної науково-дослідної роботи можна зробити наступні висновки:

• Дослідження показали, що графітові електроди марок ЕГСП та МПГ-7 придатні для синтезу вуглецевих наноматеріалів електродуговим методом.

• Експерименти показали, що графіт марки ЕГСП в електродуговому синтезі в газовому середовищі дозволяє створити сантиметрові композитні стрижні (депозити), серцевина яких складається з графенових листів, згорнутих в нанотрубки, які витримують надвисокі температури (>4000 К).

• Дослідження за допомогою скануючої мікроскопії показали, що синтезований депозит з графіту марки ЕГСП може розділятися на блоки, що важливо для його використання в станціях високого напруження тому, що можна готувати депозити необхідної довжини без механічного впливу.

• Дослідження за допомогою просвітлюванної мікроскопії показали, що в процесі електродугового випаровування електрода марки ЕГСП формуються безкаталітичні вуглецеві нанотрубки (ВНТ).

• Експерименти підтвердили, що вихід по масі пристінної фуллеренвмісної сажі при випаровуванні графіту марки ЕГСП значно перевищує результати, отримані при випаровуванні графітових електродів марки МПГ-7.

• На сьогодні одностінні вуглецеві нанотрубки (ОВНТ) є найдорожчим видом вуглецевих нанотрубок, а безкаталітичний синтез ОВНТ значно зменшує їх собівартість.

• Розрахунково-експериментальні результати показали, що фуллеренова складова в двох отриманих зразках фуллеренвмісної сажі з графіту марки ЕГСП становить від 10 до 12 мас. %, що не гірше, а іноді краще показників графіту марки МПГ-7.

ПЛАЗМОХІМІЧНИЙ СИНТЕЗ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОСТРУКТУР У РІДКОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Золотаренко Ол.Д. [1,2], **Золотаренко Ан.Д.**[1,2], **Аханова Н.Е.** [3,4], **Уалханова М.**[4], **Щур Д.В.**[1,5], **Габдуллін М.Т.**[4], **Тарасенко Ю.О.**[1], **Рудакова О.П.** [1], **Золотаренко О.Д.**[1], **Чимбай М.В.**[1], **Загорулько І.В.**[6]

[1] *Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, вул. Генерала Наумова, 17, Київ 03164, Україна*
[2] *Інститут проблем матеріалознавства імені І.М. Францевича НАН України, вул. Кржижановського 3, Київ 03142, Україна*
[3] *Казахської-британський технічний університет (КБТУ) пр. аль-Фарабі, 71, Алмати 050040, Казахстан*
[4] *Національна нанотехнологічна лабораторія, КазНУ ім. Аль-Фарабі пр. аль-Фарабі, 71, Алмати 050040, Казахстан*
[5] *Інститут прикладної фізики НАН України, вул. Петропавлівська, 58, Суми 4000, Україна*
[6] *Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, бульв. Академіка Вернадського 36, Київ 03142, Україна*
**Тел.: +38 974452983 E-mail: o.d.zolotarenko@gmail.com*

З оглядової науково-дослідної роботи можна зробити висновок, що на сьогоднішній день плазмохімічний синтез вуглецевих наноструктур (ВНС) у рідкому середовищі є найменш вивченим методом.

Основні висновки:

● Один із найважливіших результатів аналізу полягає в тому, що при дії електричної дуги хімічний склад діелектричного рідкого середовища та електродів може стимулювати зростання різних гібридних модифікацій ВНС.

● Наукова проблема агломерації вуглецевих наночастинок у процесі їх синтезу електродуговим методом у рідкому середовищі вирішена шляхом встановлення спеціального магнітного вібратора на електрод, що дозволяє зводити та розводити електроди за частки секунди, створюючи тим самим уривчасту електричну дугу. Таке нововведення дозволяє контролювати високу швидкість синтезу. Проблема агломерації наноструктур порушувалася майже в кожній статті електродугового методу.

● Наукова проблема формування депозиту, як побічного продукту синтезу ВНС електродуговим методом у рідкому середовищі, вирішена збільшенням міжелектродного зазору (>1 мм) або встановленням спеціального магнітного вібратора, який дозволяє зводити та розводити електроди за частки секунди.

● Розроблено різні режими промислового синтезу одностінних вуглецевих наноструктур (ОВНС).

● Виведено режими створення дефектних вуглецевих наноструктур, як метод збільшення площі адсорбції у наночастинок.

● Розроблений метод підвищує продуктивність електродугового синтезу ВНС у рідкому середовищі, де використовується порошковий електрод насипного характеру.

ЕЛЕКТРОЛІТИЧНИЙ МЕТОД СИНТЕЗУ НАНОПОРОШКІВ Ni та Cu

Золотаренко Ол.Д. [1,2], **Золотаренко Ан.Д.**[1,2], **Аханова Н.Е.** [3,4], **Уалханова М.**[4], **Щур Д.В.**[1,5], **Габдуллін М.Т.**[4], **Тарасенко Ю.О.**[1], **Рудакова О.П.** [1], **Золотаренко О.Д.**[1], **Чимбай М.В.**[1], **Загорулько І.В.**[6]

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

[2] *Інститут проблем матеріалознавства імені І.М. Францевича НАН України, вул. Кржижановського 3, Київ 03142, Україна*

[3] *Казахської-британський технічний університет (КБТУ) пр. аль-Фарабі, 71, Алмати 050040, Казахстан*

[4] *Національна нанотехнологічна лабораторія, КазНУ ім. Аль-Фарабі пр. аль-Фарабі, 71, Алмати 050040, Казахстан*

[5] *Інститут прикладної фізики НАН України, вул. Петропавлівська, 58, Суми 4000, Україна*

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

[*] *Тел.: +38 974452983 E-mail: o.d.zolotarenko@gmail.com*

У даній роботі представлено найбільш економічно та практично вигідний серед інших спосіб електрохімічного катодного синтезу нікелевого (Ni) нанопорошку з середнім розміром часток 55 нм. В якості електроліту застосовували розчин сульфату нікелю ($NiSO_4$) з додаванням хлориду нікелю II ($NiCl_2$), борної кислоти (H_3BO_3) та тіосечовини ($(NH_2)_2CS$). Процес електролізу проводили при температурі 45-65 ºС упродовж двох годин, використовуючи високочистий алюмінієвий (Al) катод та платиновий (Pt) анод.

Електрохімічним методом синтезовано наночастки – дендрити міді (Cu) високої дисперсності (до 40 нм). Було проведено електроліз розчину електроліту (основна складова – $CuSO_4$) з низьким вмістом мідіза умови високого значення густини катодного струму та відносно низької температури (практично кімнатної - 23 ºС).

Складність процесу електрохімічного синтезу нанопорошку міді була пов’язана з необхідністю видалення мідного шламу з електролізеру. З цією метою здійснювали періодичні удари по катоду, який внаслідок таких маніпуляцій осипався на дно електролітичної ванни приблизно після 13 ампер-годин електролізу на 1 $дм^2$ поверхні катоду.

Розроблену технологію можна застосовувати для промислового виробництва кристалічних нанопорошків міді та нікелю. Окрім того, отримані результати можна використати у виробництві сучасних залізо-нікелевих (Fe-Ni) акумуляторів.

Також попередні дослідження показали, що такий нанопорошок вже можна використовувати у технології 3D друку SLM, або для створення нових композитів для 3D друку у технологіях FDM, SLA, CJP.

ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ У МАТЕРІАЛОЗНАВСТВІ

“Використання Імовірнісних Моделей Дифузії для генерації треків з детектора AT-TPC”

Гаврилюк А.Є

Фізика високих енергій базується на точному генеруванні треків детекторами AT-TPC. Ці детектори часто видають заплутані дані з шумом, що ускладнює аналіз. У нашому звіті представлено інноваційне рішення: використання дифузійних імовірнісних моделей для спрощення аналізу даних AT-TPC.

Наше дослідження не лише реконструює треки з існуючих даних, але й має на меті передбачення результатів для невиконаних експериментів. Модель використовує дані про склад газу та частинки, спрощуючи дослідження та розширюючи наші знання у фізиці високих енергій.

Основною проблемою є відсутність дифузійної моделі для генерування хмар точок за заздалегідь визначених умов. Існуючі моделі створюють 3D-хмари точок без попередньо визначених умов, тоді як детектори AT-TPC вимагають 4D-хмари точок (координати X, Y, W і заряд). Наша мета — створити адаптовану модель, здатну генерувати 4D хмари точок із заздалегідь визначеними умовами, замінивши кілька спеціалізованих моделей одним універсальним інструментом.

Наш прогрес багатообіцяючий. Ми успішно навчили модель на простих формах, таких як кола та лінії, досягнувши чудових результатів. Наші постійні зусилля зосереджені на адаптації моделі до складних цифр і реальних експериментальних даних. Враховуючи його успіх у створенні попередньо визначених форм, ми з оптимізмом дивимося на його застосування в експериментах у реальному світі.

Вибір дифузійних моделей є стратегічним. Вони стабільно перевершують конкурентів у задачах генерації хмари точок, демонструючи свою придатність для генерації треків AT-TPC. Підсумовуючи, наше дослідження не лише пропонує вирішення постійної проблеми у фізиці високих енергій, але й підкреслює ключову роль імовірнісних моделей дифузії в розвитку галузі.

«МЕТОДИ ПЕРЕДБАЧЕННЯ КРИСТАЛІЧНИХ СТРУКТУР В БІБЛІОТЕЦІ PYTHON ATOMIC SIMULATION ENVIRONMENT (ASE)»

Семенюк.Б.Ю[1]

[1]*Державна наукова установа «Київський академічний університет» ,бульвар Академіка Вернадського, 36, Київ, 03142, Україна*
[*]*Тел.: +38 044 424 3025, E-mail: kau@kau.edu.ua, phystech.kau@gmail.com*

Кристалічні структури в матеріалах є важливими не лише з теоретичного, але й з практичного погляду. Вони визначають фізичні та хімічні властивості матеріалу, такі як міцність, провідність, теплопровідність та багато інших. Передбачення кристалічних структур – це процес визначення, як атоми у матеріалі організовані в просторі.

Звідси виникає запитання: яким чином ми можемо знайти оптимальне атомне розташування у матеріалі без проведення дорогих та часомістких експериментів? Саме для відповіді на це запитання і призначена бібліотека Python Atomic Simulation Environment (ASE)[1].

ASE надає засоби для обчислювального моделювання кристалічних структур. Ця бібліотека містить широкий спектр інструментів та методів, які дозволяють науковцям та інженерам прогнозувати, аналізувати і оптимізувати кристалічні структури матеріалів. Завдяки ASE, можливо визначити такі параметри, як енергія кристалічної структури, оптимальні відстані між атомами, кутові параметри та багато інших характеристик.

Методи передбачення кристалічних структур в ASE надає три методи глобальної оптимізації: Basin hopping ,Minima hopping та генетичні алгоритми (Genetic algorithms) Ці методи дозволяють вивчати різні класи матеріалів і визначити їхні структурні властивості. У подальшій доповіді ми висвітлимо їхнє використання для передбачення кристалічних структур у матеріалах.

1. Vilhelmsen, L. B. & Hammer, B. A genetic algorithm for first principles global structure optimization of supported nano structures. *J. Chem. Phys.* **141**, (2014).

PREDICT CMS DATA POPULARITY TO IMPROVE ITS AVAILABILITY FOR PHYSICS ANALYSIS

Dmytro Kovalskyi[1,2], Rahul Chauhan[2], Hasan Ozturk[2], Andrii Len[3]

[1]Massachusetts Institute of Technology,
77 Massachusetts Avenue, Cambridge, MA, USA
[2]CERN,
1 Esplanade des Particules, P.O. Box 1211, Geneva 23, Switzerland
[3]Taras Shevchenko National university of Kyiv,
4 Akademika Glushkova Street, 03680 Kyiv, Ukraine

The Compact Muon Solenoid (CMS) [1] data management team is responsible for distributing data among various computing centers globally. However, due to limited disk space at these centers, it becomes necessary to dynamically manage the data available on disk. When data is not readily available on disk, users have to wait for it to be retrieved from permanent tape storage [2], causing delays in data analysis and hindering scientific productivity.

To overcome this challenge, this project aims to develop a tool that utilizes machine learning [3] algorithms to predict which data should be retained on disk based on current usage patterns. By leveraging machine learning techniques, it should be possible to analyze historical data usage patterns and identify trends or patterns that indicate the popularity or likelihood of future data access. This predictive capability allows the CMS data management team to proactively allocate disk space to the data that is more likely to be requested, ensuring faster access for users and minimizing the need for retrieving data from tape storage.

During the work, various file characteristics were studied and a machine learning model was built capable of predicting with up to 90% accuracy.

[1] CMS Collaboration, “The CMS experiment at the CERN LHC”, JINST 3 (2008) S08004, doi:10.1088/1748-0221/3/08/S08004.
[2] Natalia Ratnikova | WLCG pre-GDB Storage | CMS staging from tape. [3] Alex Smola and S.V.N. Vishwanathan, ”Introduction to Machine Learning”, Cambridge University Press 2008.

МІЖДИСЦИПЛІНАРНІ АСПЕКТИ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА

ДЕПІНІНГ ВИХОРІВ АБРИКОСОВА У НАДПРОВІДНИКАХ ДРУГОГО РОДУ ЗІ СТОВПЧАСТИМИ ДЕФЕКТАМИ В ПОПЕРЕЧНОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ

Гречиха О.С.[1(*)], Касаткін О.Л.[2]

[1]Державна наукова установа «Київський академічний університет», бульвар Академіка Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна

[2]Інститут металофізики імені Г.В. Курдюмова НАН України, бульвар Академіка Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна

**Тел.: +38 066 670 3747 E-mail: o.hrechykha@kau.edu.ua*

Сучасним трендом у виробництві надпровідних матеріалів з високою здатністю переносити струм є застосування нанотехнологічних підходів, що дозволяє створювати всередині надпровідника штучну дефектну наноструктуру, яка здатна забезпечити сильний пінінг абрикосовських вихорів і, відповідно, бездисипативне протікання надплинного струму [1,2].

В даній роботі чисельними методами у пакеті Wolfram Mathematica розглянуто стійкість запінінгованого стану вихору Абрикосова у надпровіднику другого роду зі стовпчастими дефектами в поперечному до осі дефекту магнітному полі. Шляхом мінімізації функціоналу енергії вихору, отримано рівноважну форму пружної вихрової нитки. Обраховано і візуалізовано форму вихрової нитки та залежність положення кінців вихору на поверхні зразку від густини мейсснерівського струму. Показано, що при певному критичному значенні густини струму зміна форми вихрової нитки відбувається стрибком, а також перехід нитки у вільний (незапінінгований) стан.

В роботі знайдено залежності величин зміщення кінців вихорів та енергії вихору від густини струму, а також критичної густини струму від товщини надпровідної пластини. Показано, що при зростанні товщини зразку критична густина струму спадає. Розв’язано нестаціонарне рівняння динаміки вихрової нитки. З вигляду розв’язків цього рівняння зроблено висновок про існування характерного часу, за який відбувається депінінг вихору з лінійного дефекту у поперечному магнітному полі. Отримані результати якісно узгоджуються із відповідними даними експериментів [3].

1. Kwok W.-K., Welp U., Glatz A. [et. al.], Rep. Prog. Phys. 79, 116501 (2016).

2. Maiorov B., Baily S. A., Zhou H. [et. al.], Nat. Mater. 8, 398 (2009).

3. Smith A.W., Jaeger H. M., Rosenbaum T. F., Kwok W. K. [et. al.], Phys. Rev. B 63, 064514 (2001).

ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОЛІТИЧНОГО НАВОДНЮВАННЯ СТАЛІ Х70 ТА ТРУБИ ТРИВАЛОЕКСПЛУТОВАНОГО МАГІСТРАЛЬНОГО ГАЗОПРОВОДУ

Ниркова Л.І., Клименко А.В.[1], Харченко Ю.О.[1*], Лавренюк В.В.[2]

[1]Інститут електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України, Україна
[2]Київський національний університет технологій та дизайну, Україна
[*]Тел.: +38 067 281 37311, E-mail: yu.kh.gsm@gmail.com

Проведено порівняльні дослідження схильності до електролітичного наводнювання у модельному ґрунтовому електроліті NS4 (г/л: 0.122 KCl + 0.483 $NaHCO_3$ + 0.181 $CaCl_2$ + 0.131 $MgSO_4$, pH 8.2) за катодної поляризації в діапазоні потенціалів від -0,75 В до -1,05 В зразків сталевого листа (σ_B = 590 МПа) та труби тривалоексплуатованого магістрального газопроводу (σ_B = 588 МПа) зі сталі категорії міцності Х70. Встановлено, що для обох видів зразків концентрація водню, що проникає в сталь при катодній поляризації, немонотонно зростає із зміщенням потенціалу від -0,75 В до -1,05 В. Ці потенціали відповідають мінімальному та максимальному захисному потенціалам, що застосовуються для катодного захисту магістральних газопроводів від корозії. Відзначено, що наводнювання зразків експлуатованої сталі починається за нижчого захисного потенціалу, ніж зразків зі сталевого листа: за -0,95 В та -1,05 В, відповідно. Концентрація водню, що дифундує в сталь, для зразків з листа змінюється в ряду 0 → 0 → 0,057 моль/м^3 [1], для зразків з експлуатованої труби – 0 → 0,019 → 0,024 моль/м^3.

Як наслідок перебігу процесу дифузії водню спостерігали підвищення схильності до корозійного розтріскування зразків з експлуатованої труби порівняно із зразками з листової сталі. Коефіцієнт схильності до корозійного розтріскування K_S (оцінений як відношення відносного звуження зразків у повітрі $\psi_п$ до відносного звуження за впливу корозійного чинника у розчині $\psi_п$) для листа зі сталі змінювався менш інтенсивно, ніж для зразків з експлуатованої труби: 1,06 → 1,06 → 1,18 та 1,25 → 1,35 → 1,53, відповідно.

Таким чином, встановлено підвищення схильності до елктролітичного наводнювання зразків тривалоексплуатованого в умовах комплексного протикорозійного захисту магістрального газопроводу порівняно із зразками зі сталевого листа, і як наслідок – підвищення схильності до корозійного розтріскування.

1. L. I. Nyrkova, A. V. Klymenko, S. O. Osadchuk & S. Y. Kovalenko. *International Journal of Hydrogen Energy,* Available online 12 July 2023 (2023). https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.06.316
2. L.Nyrkova, A. Rybakov, L. Goncharenko, S. Osadchuk & Kharchenko Y. Analysis of the causes of fracture of the main gas pipeline. *Zaštita materijala*, ***64***, No. 2: 177 (2023). https://doi.org/10.5937/zasmat2302177N

BEHAVIOUR OF DISPERSED PARTICLES IN WATER TREATMENT DURING LIME SOFTENING AND ACID STABILISATION TREATMENT

Kuznietsov P.M.[1,2(*)], Yaroschuk O.V.[1,2], Biedunkova O.O.[1], Pryshchepa A.M.[1]

[1]National university of water and environmental engineering, Soborna Str, 11, 33028 Rivne city, Ukraine
[2]SE «Rivne NPP», Promyslova Str, 34400 Varash city, Ukraine
[*]Тел.: +38 066 607 8214 E-mail: p.m.kuznietsov@nuwm.edu.ua

The study of the formation of suspended solids in treated water during liming and corrective treatment with sulfuric acid (H_2SO_4) and 1-hydroxy ethylidene-1,1-diphosphonic (HEDP) was carried out, the change in the components of treated water was shown, the particle size distribution was determined, and microscopic images of suspended solids in treated water were obtained (Fig. 1). The purpose of the research was to determine the processes of formation of chemical composition, changes in size and structure of particles formed during lime softening and corrective anti-scale treatment of cooling water, the results of which can be used to optimize water treatment technology in order to reduce the flow of suspended solids into cooling systems.

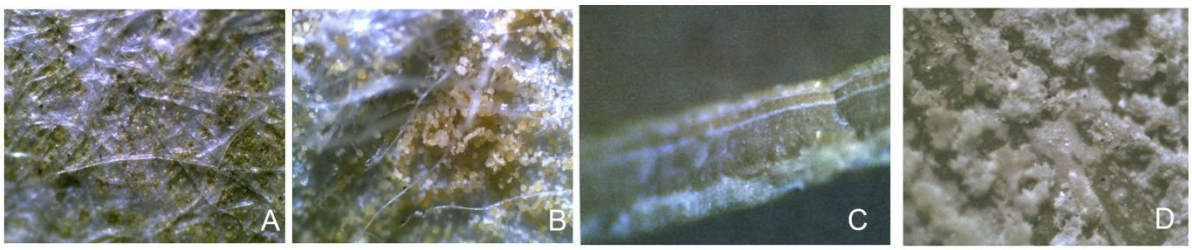


Fig. 1. Structure of suspended solids (A – fresh inlet water, B –water treatment by liming and corrective treatment with H_2SO_4+HEDP) and microscopy of circulating cooling system deposits (C – carbonate deposits formed as a result of scale formation, D - sediments formed as a result of agglomeration of suspended solids)

It has been shown that in the process of water treatment, the composition of suspended solids changes from mixed to calcium carbonate, particles are enlarged and their content increases compared to the input water, which requires the use of additional treatment methods, in particular, filtering of treated water. In the process of treatment by liming and corrective treatment with H_2SO_4+HEDP, a change in the chemical composition of suspended solids is observed, and simultaneously with the change in the chemical composition, the size and morphology of the particles change, the suspended solids become larger and the crystal structure of the particles appears. Changes in the chemical and particle size distribution of suspended solids indicate the formation of new particles that are crucial in the formation of the total total suspended solids (TSS) content in treated water during lime softening. Taking into account the results of determining the TSS concentration and their particle size distributions, a filter material with pores of 20 μm was selected, which allows separating up to 70 % of particles and reducing the TSS content.

КОРОЗІЙНЕ РОЗТРІСКУВАННЯ ЗВАРНОГО З'ЄДНАННЯ ЗІ СТАЛІ КОНТРОЛЬОВАНОЇ ПРОКАТКИ В УМОВАХ КАТОДНОГО ЗАХИСТУ

Ниркова Л.І., Лісовський Ю. І.[*], Файнберг Л. Й.[1] Гончаренко Л.В.,

[1]Інститут електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України, Україна
[*]Тел.: +38 067 479 00 95, E-mail: lisovskuy1992@gmail.com

Наведено результати корозійно-механічних досліджень зварного з'єднання зі сталі контрольованої прокатки 10Г2ФБ.

Зварювання виконували на апараті А 909 М по V-образній розробці кромок розміром 90°×4 мм. Процес зварювання проводили під флюсом ОК 10-74 дротом S3Mo-TiB, режим: I=850-890 А; U=38 В; $V_{зв}$=25 м/год; $V_{пд}$=110 м/г (швидкість подачі зварювального дроту). Формування шва було задовільним: проплавлення складало 11 мм, розмір підсилення (22×4) мм.

Одним з ключових параметрів забезпечення опірності крихкому руйнуванню є висока ударна в'язкість зварного шва [1]. Завдяки застосованій технології зварювання та зварювальних матеріалів цей показник становив 199,1 та 189,0 Дж/см^2 для зварного шва (за температур -20 та -40^{o}C) та 128,3 та 117,1 для основного металу (за температур -15 та -40^{o}C).

Корозійно-механічні випробування проводили методом деформації з малою швидкістю 10^{-6} c^{-1} у модельному ґрунтовому електроліті в нормованому згідно з ДСТУ 4219 діапазоні потенціалів катодного захисту (від -0,75 В до -1,05 В). Схильність до корозійного розтріскування оцінена за коефіцієнтом K_S [2] (відношення відносного звуження зразків у повітрі $\psi_п$ до відносного звуження за впливу корозійного чинника у розчині $\psi_р$), за потенціалів -0,75 В та -1,05 В для основного металу майже однакова, K_S: 0,97 та 0,99, для зварного з'єднання K_S дорівнює 1,17 та 1,28. Отже визначено, підвищення потенціалу катодної поляризації від мінімального -0,75 В до максимального -1,05 В сприяло зростанню схильності зварного з'єднання до крихкого руйнування. Встановлено також, що розрив зразків зварного з'єднання відбулося на відстані (8-10) мм від лінії сплавлення, що цілком закономірно, оскільки шов має вищу міцність порівняно з основним металом.

Таким чином, зварне з'єднання зі сталі 10Г2ФБ, виконане під флюсом ОК 10-74 дротом S3Mo-TiB, завдяки високим в'язким властивостям шва має задовільну опірність крихкому руйнуванню за катодної поляризації.

1. Nyrkova L.I., Rybakov A. O., Goncharenko L.V., Osadchuk , Kharchenko Yu. O. *Analysis of the causes of fracture of the main gas pipeline*. Zastita materijala. 2023. 2. P. 177-186. https://doi.org/10.5937/zasmat2302177N
2. Nyrkova L., Osadchuk S. Stress-corrosion cracking of the steels of main gas pipeline: assessment and prevention. Naukova dumka. – 2023. – 216 p. https://doi.org/10.15407/978-966-00-1845-7

ХІМІЧНА НЕОДНОРІДНІСТЬ МЕТАЛУ ШВІВ ПРИ ЛАЗЕРНОМУ ЗВАРЮВАННІ СТАЛІ AISI 321 У РІЗНИХ ПРОСТОРОВИХ ПОЛОЖЕННЯХ

Бернацький А.В.[1], Сіора О.В.[1], Юрченко Ю.В.[1(*)], Соколовський М.В.[1], Коваль Ю.М.[2], Фірстов Г.С.[2], Кедровський С.М.[2], Сліпченко В.М.[2]

[1] Інститут електрозварювання ім. Є.О. Патона Національної академії наук України, вул. Казимира Малевича, буд. 11, м. Київ, 03150, Україна

[2] Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова Національної академії наук України, бул. Академіка Вернадського, буд. 36, м. Київ, 03142, Україна

[*]Тел.: +38 044 2052365 E-mail: yuriyyurchenko14@gmail.com

Мета роботи полягала в аналізі впливу зміни просторового положення при лазерному зварюванні високолегованої корозійно-стійкої жароміцної сталі AISI 321 на хімічну неоднорідність металу швів. Для досягнення поставленої мети виконували провари у зразках зі сталі AISI 321, товщиною 3 мм на раніше підібраному оптимальному режимі зварювання (з позицій геометрії швів, рівня механічних характеристик, кількості дефектів тощо). Дослідження мікроструктури та концентраційних змін хімічних елементів проводилися в різних ділянках зразків: металі шва (верхня частина, центр та корінь шва), лінії сплавлення, зоні термічного впливу (ЗТВ) і в основному металі. Досліджували зміну концентрації хімічних елементів як на окремих ділянках, так й по лінії, або у окремих точках.

Встановлено, що при зміні просторового положення при лазерному зварюванні високолегованої корозійно-стійкої жароміцної сталі AISI 321 найбільші концентраційні зміни спостерігаються по Ni та Cr.

Відсоток Ni найбільше зростає по межах кристалітів у верхній ділянці металу швів зразків, які були зварені у нижньому просторовому положенні та при куті 45°. І навпаки, відсоток Cr прямопропорційно зменшується на вказаних ділянках при лазерному зварюванні у нижньому просторовому положенні та при куті 45°. Встановлено, що саме градієнт по концентрації Ni та Cr між об’ємом кристалітів і міжзереними границями може сприяти зниженню в'язкості металу у даних ділянках та призводить до нерівномірного рівня твердорозчинного зміцнення. Все це впливає на рівень механічних характеристик зварних з’єднань.

При лазерному зварюванні зразків високолегованої корозійно-стійкої жароміцної сталі AISI 321 на підйом при куті 90 градусів, забезпечується найбільш рівномірний розподіл концентрації елементів між об’ємом кристалітів та їх границями. Це дозволяє забезпечити найвищий рівень характеристик міцності, при найбільшій стабільності показників результатів зварювання та найменшій кількості дефектів.

КОРОЗІЯ ВІД НАПРУЖЕННЯ СТАЛІ ДЛЯ МАГІСТРАЛЬНИХ ГАЗОПРОВОДІВ В УМОВАХ ПІДЗЕМНОЇ КОРОЗІЇ

Ниркова Л.І., Браточкин О.В.*, Осадчук С.О., Гончаренко Л.В.

Інститут електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України, Україна
**Тел.: +380 93 725 1943, E-mail: itselfmade@gmail.com*

Вологість ґрунту, що створює умови тонкоплівкової корозії, є одним з вагомих чинників корозійного розтріскування, яке призводить до аварій на магістральних газопроводах [1, 2].

Представлені порівняльні результати лабораторних досліджень сталі трубного сортаменту контрольованої прокатки Х70, з якої побудовані магістральні газопроводи з труб великого діаметру на території України, в умовах впливу найвагоміших чинників: тонкоплівкової корозії, катодної поляризації та розтягових напружень.

Застосовували методи потенціометрії, вольтамперометрії, деформації з малою швидкістю за максимального захисного потенціалу -1,05 В у розчині NS4 та у модельному ґрунтовому середовищі, що містило 20 % NS4 та 80 % піску (згідно з літературними даними, за такої вологості ґрунту спостерігається найбільша швидкість корозії), растрової електронної мікроскопії. За результатами електрохімічних досліджень визначено, що у ґрунтовому середовищі граничний дифузійний струм відновлення кисню нижче (0,071 А/м^2) порівняно із струмом у розчині NS4 (0,128 А/м^2), що корелює із значеннями швидкості корозії, визначеними методом масометрії – 0,039 та 0,020 мм/рік. За максимального захисного потенціалу -1,05 В виявлено підвищення схильності сталі Х70 до корозійного розтріскування за крихким механізмом в умовах тонкоплівкової корозії, на що вказує зменшення показників: відносного подовження від 28,0 % у повітрі до 25,6 та 24,6 % у розчині та модельному ґрунтовому середовищі; відносного звуження – від 72,6 до 65,3 та 60,6 %, відповідно. Деталі рельєфу зразків, зруйнованих у розчині, здебільшого включають фасетки сколу та ямки від міжзеренного руйнування. Після розриву у модельному ґрунтовому середовищі спостерігали змінення стану металу у більш крупних окремих локальних зонах: фасетки сколу мають вигляд неглибоких ямок, з'єднаних гребнями відриву.

Таким чином, в умовах тонкоплівкової корозії за максимального захисного потенціалу -1,05 В корозія від напруження сталі Х70 перебігає переважно за крихким механізмом, що підтверджено зміною показників відносного подовження та відносного звуження зразків, а також результатами аналізу поверхні руйнування.

1. Nyrkova L. (2020). Stress-corrosion cracking of pipe steel under complex influence of factors. *Engineering Failure Analysis*, *116*, 104757. https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2020.104757

2. Nyrkova L., Goncharenko L., Lisovyi P., Osadchuk S., Klymenko A., Kostin V. Stress-corrosion cracking of steels for main gas pipelines. *Mechanical technologies and structural materials*. Conference Proceedings. 2022. P. 119-129. http://www.strojarska-tehnologija.hr/img/pdf/Conference_Proceedings_MTSM_2022.pdf

DataverseUA: Впровадження репозиторію відкритих наукових даних в Україні

Романський А.О.[1(*)], Денисюк Н.М.[2], Мокляк С.В.[1], Свістунов С.Я.[3], Шадура В.М.[4]

[1]Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульвар Академіка Вернадського, 36, Київ, 03142, Україна
[2] Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України,
вул. Кржижановського, 3, Київ, 03142, Україна
[3]Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України,
вул. Метрологічна 14-б, Київ, 03143, Україна
[4]Київський академічний університет,
бульвар Академіка Вернадського, 36, Київ, 03142, Україна
[*]Тел.: +38 068 943 1724 E-mail: anromansky@gmail.com

Наукова спільнота та Єврокомісія з 2017 року працюють над створенням інфраструктури Відкритої науки що регулюється Деректівою ЄС [1] для забезпечення взаємодії з дослідницькими інфраструктурами в Європі для відкритого, безперешкодного доступу та надійного повторного використання даних і всіх інших цифрових об'єктів, створених протягом життєвого циклу дослідження.

На хмарному кластері Інституту теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України інстальовано тестовий варіант Репозиторію DataverseUA версії v.5.13 (https://www.dataverse.net.ua/). Репозіторій відкритих даних в першу чергу розраховано на наукових співробітників Центрів колективного користування наукового обладнання (ЦККНО) та наукових установ НАН України що продукують дослідницькі дані, тому було виконано українізацію інтерфейсу платформи. Були розроблені форми реєстрації наукових установ, користувачів та підключена розширена система авторизації. На даний час створено профілі для двох установ НАН України та двох ЦККНО у їх складі, а також розроблено персональні файли розширених метаданих з урахуванням специфіки роботи і тематики досліджень які проводяться в даних установах. Окрім того, розроблено та підготовлено проекти документів, що забезпечують захист прав сторін при використанні Репозитарію відкритих даних. На даний час виконується узгодження та доповнення цих документів. В результаті перемовин Київського академічного університету з організацією DataCite було забезпечено можливість отримання DOI для наборів відкритих даних що будуть розміщені в Репозиторії DataverseUA.

На даний момент Репозиторій DataverseUA знаходиться на стадії дослідної експлуатації і працює у тестовому режимі. Репозиторій DataverseUA має забезпечити інтероперабельний доступ до даних із збереженням прав інтелектуальної власності дослідників, які розмістили дані наукових досліджень у репозиторії.

1. DIRECTIVE (EU) 2019/1024 OF THE EUROPEAN PARLIAMENT AND OF THE COUNCIL of 20 June 2019 on open data and the re-use of public sector information/

Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України
Україна, 03142, Київ, бульвар Академіка Вернадського, 36
Телефон:
дирекція: + (380) 44 4241005
учений секретар: + (380) 44 4243110
Факс: + (380) 44 4242561
Email: metall@imp.kiev.ua

Голова організаційного комітету — к.ф.-м.н. Віталій Бевз

Сайт конференції: https://www.imp.kiev.ua/mmsmt/

Матеріали було отримано в авторській редакції, відповідальність за зміст несе автор.