

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СХІДНОЄВРОПЕЙСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ЛЕСІ УКРАЇНКИ, УКРАЇНА  
ВІЛЬНЮСЬКИЙ УНІВЕРСИТЕТ, ЛИТВА  
АКАДЕМІЯ ІМ. ЯНА ДЛУГОША В ЧЕНСТОХОВІ, ПОЛЬЩА  
ЧЕНСТОХОВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ, ПОЛЬЩА**



## **«АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ І ПРИКЛАДНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ»**

**Матеріали Міжнародної інтернет-конференції молодих учених та студентів**

**Конференція проводиться за підтримки Міністерства освіти і науки України  
(Договір М/106-2014 від 23.06.2014 р.) та Науково-дослідницької ради Литви  
(Проект №ТАР-LU 02/2014)**

**Луцьк, Україна, 27-28 січня 2015 року**

THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE  
LESYA UKRAINKA EASTERN EUROPEAN NATIONAL UNIVERSITY, UKRAINE  
VILNIUS UNIVERSITY, LITHUANIA  
JAN DLUGOSZ ACADEMY IN CZESTOCHOWA, POLAND  
CZESTOCHOWA UNIVERSITY OF TECHNOLOGY, POLAND



## «TOPICAL ISSUES OF FUNDAMENTAL AND APPLIED STUDIES»

International internet conference for young researchers and students  
Book of abstracts

Conference is sponsored by the Ministry of Education and Science of Ukraine (Contract M/106-2014 dated 23.06.2014) and by the Research Council of Lithuania (Project No TAP-LU 02/2014)

Lutsk, Ukraine, January 27-28, 2015

УДК 53(063)+004(063)  
ББК 22.3я431+32.97я431  
А-43

**Конференція проведена за підтримки Міністерства освіти і науки України (Договір М/106-2014 від 23.06.2014 р.) та Науково-дослідницької ради Литви (Проект №ТАР-LU 02/2014)**

***Редакційна колегія:***

***Сергій Федосов*** – доктор фізико-математичних наук, декан фізичного факультету Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, Україна

***Галина Мирончук*** – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри фізики твердого тіла та інформаційно-вимірювальних технологій Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, Україна

***Жолт Кормош*** – кандидат хімічних наук, професор, завідувач кафедри аналітичної хімії і екотехнологій Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, Україна

***Michał Piasecki*** – доктор кафедри теоретичної фізики Академії ім. Яна Длугоша в Ченстохові, Польща;

***Iwan Kityk*** – доктор наук, професор факультету електротехніки Ченстоховського політехнічного університету, Польща;

***Vaidotas Kažukauskas*** – доктор наук, професор кафедри фізики напівпровідників Вільнюського університету, Литва.

А-43 **Актуальні проблеми фундаментальних і прикладних досліджень : матеріали Міжнар. інтернет-конф. молодих учених та студентів (27-28 січ. 2015 р.) = Proceedings of International internet conference for young researchers and students (January 27-28, 2015) / за заг. ред. С. Федосова, Г. Мирончук. – Луцьк : Вежа-Друк, 2015. – 120 с.**

У виданні вміщено матеріали наукових досліджень учасників Міжнародної інтернет-конференції молодих учених та студентів «Актуальні проблеми фундаментальних і прикладних досліджень».

Розкрито деякі актуальні питання розробки та використання автоматизованих систем збору даних та керування, комп'ютерного моделювання, фізико-технічних проблем матеріалознавства, фізики конденсованого стану, наукових принципів створення нових аналітичних систем та одержання та властивостей твердотільних матеріалів. Рекомендовано науковцям, викладачам, аспірантам та студентам.

УДК 53(063)+004(063)  
ББК 22.3я431+32.97я431

## АВТОМАТИЗОВАНІ СИСТЕМИ ЗБОРУ ДАНИХ ТА КЕРУВАННЯ AUTOMATED SYSTEMS OF DATA COLLECTION AND MANAGEMENT

---

<b>Oleksandr Martyniuk</b> KEY PROGRAM INFORMATION SECURITY THREATS IN AUTOMATED DATA COLLECTION SYSTEMS.....	8
<b>Гаєвський В. Р.</b> АВТОМАТИЗАЦІЯ КОНДУКТОМЕТРИЧНО-ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНИХ ВІМІРЮВАНЬ ПРИ ДОСЛІДЖЕННІ КАРБОНАТНОЇ ВОДНОЇ СИСТЕМИ .....	10
<b>Сачук М. В.</b> АВТОМАТИЗАЦІЯ ПОБУДОВИ КУРСУ СИЛОВИХ ТРЕНУВАНЬ В ТРЕНАЖЕРНОМУ ЗАЛІ .....	13
<b>Сідлецький В. В.</b> ВИКОРИСТАННЯ МАТЕМАТИЧНОГО АПАРАТУ НЕЧІТКОЇ ЛОГІКИ В СИСТЕМАХ АВТОМАТИЗОВАНОГО КЕРУВАННЯ .....	14

## КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ COMPUTER MODELING

---

<b>Головіна Н. А., Артюх В.О., Яневич І.В.</b> МОДЕЛЮВАННЯ КОНФОРМАЦІЙНОЇ МОБІЛЬНОСТІ МЕЗОГЕННИХ КРИСТАЛІВ .....	18
<b>Гриб'юк О. О., Юнчик В. Л.</b> ДЕЯКІ АСПЕКТИ МОДЕЛЮВАННЯ У ПРОЦЕСІ НАВЧАННЯ З ВИКОРИСТАННЯМ ІНФОРМАЦІЙНО-КОМУНІКАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ .....	21
<b>Мащенко В. В.</b> ВЕЙВЛЕТ-АНАЛІЗ СУПУТНИКОВИХ ЗНІМКІВ ЗЕМНОЇ ПОВЕРХНІ .....	24
<b>Якимюк В. О., Ярошак С. В.</b> КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НЕЛІНІЙНИХ ПРОЦЕСІВ ВИТІСНЕННЯ НАФТИ ПРИ ПЛОЦЦОВОМУ ЗАВОДНЕННІ .....	28

## ФІЗИКО-ТЕХНІЧНІ ПРОБЛЕМИ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА PHYSICAL AND TECHNICAL ASPECTS OF MATERIALS SCIENCE

---

<b>Janusz Kuliński, Sylwester Kania, Piotr Balczewski, Joanna Skalik</b> CHARGE LIFE TIME IN THE TIME OF FLIGHT MEASUREMENTS FOR AROMATIC HYDROCARBONS .....	30
<b>Денисюк Н. М., Хижун О. Ю., Мирончук Г. Л., Парасюк О.В.</b> ОСОБЛИВОСТІ КРАЮ ОПТИЧНОГО ПОГЛИНАННЯ МОНОКРИСТАЛА $Tl_3PbI_5$ .....	32

<b>Клюйко В. Г.</b> МОДЕЛЮВАННЯ ПЛАЗМОВИХ ПРОЦЕСІВ В РЕЛАКСАЦІЙНІЙ ОПТИЦІ .....	36
<b>Скарвінко А. Р., Каштан М.</b> МОДЕЛІ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ПЕРЕХОДІВ В $Er^{3+}$ АКТИВОВАНИХ СКЛОПОДІБНИХ СПЛАВАХ СИСТЕМИ $Ag_{0,05}Ga_{0,05}Ge_{0,95}S_2 - Er_2S_2$ .....	38
<b>Столярчук О. К., Шаварова Г. П.</b> ЗВ'ЯЗОК ДЕЯКИХ НЕЛІНІЙНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ КРИСТАЛІВ З ЇХ СТРУКТУРОЮ .....	40

## **ФІЗИКА КОНДЕНСОВАНОГО СТАНУ PHYSICS OF THE CONDENSED STATE**

---

<b>Вовчук Г. В., Шигорін П. П.</b> ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ В УЛЬТРАХОЛОДНИХ ФЕРМІ-ГАЗАХ.....	43
<b>Дмитрук І. П., Шигорін П. П.</b> ЗГАСАННЯ ЗВУКІВ В ПРОСТОРОВО-ОДНОРІДНОМУ КОНДЕНСОВАНОМУ БОЗЕ-ГАЗІ.....	45
<b>Ільків В. Я., Зауличний Я. В., Яворський Ю. В., Зарко В. І.</b> ЕНЕРГЕТИЧНИЙ ПЕРЕРОЗПОДІЛ ВАЛЕНТНИХ $Op-$ , $Alsd-$ ТА $Sisd-$ ЕЛЕКТРОНІВ ВНАСЛІДОК МЕХАНОАКТИВАЦІЇ СУМІШЕЙ $0.2*Al_2O_3+0.8*SiO_2$ . .....	47
<b>Яворський Ю. В., Зауличний Я. В., Ільків В. Я., Зарко В. І., Міщенко. В. М.</b> ЗМІНА ЕНЕРГЕТИЧНОГО РОЗПОДІЛУ ВАЛЕНТНИХ ЕЛЕКТРОНІВ СУМІШЕЙ $x-SiO_2+y-\alpha-Fe_2O_3$ ДО І ПІСЛЯ МЕХАНОАКТИВАЦІЇ .....	49

## **НАУКОВІ ПРИНЦИПИ СТВОРЕННЯ НОВИХ АНАЛІТИЧНИХ СИСТЕМ SCIENTIFIC PRINCIPLES OF NEW ANALYTICAL SYSTEMS DEVELOPMENT**

---

<b>Пона Radkowska</b> CONFORMATIONAL ISOMERS OF 4-CHLORO-1-NAPHTHOL AND 4-METHOXY- 1-NAPHTHOL - THEORETICAL ANALYSIS .....	52
<b>Бережна І. С., Савчук Т. І., Мазуренко І. В., Корольчук С. І., Супрунович С. В., Кормош Ж. О.</b> ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНИЙ СЕНСОР ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ САХАРИНУ .....	55
<b>Бережна І. С., Савчук Т. І., Мазуренко І. В., Корольчук С. І., Супрунович С. В., Кормош Ж. О.</b> ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНИЙ СЕНСОР ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ТІОЦІАНАТ-ІОНІВ .....	56
<b>Величко Т. С., Савчук Т. І., Мазуренко І. В., Корольчук С. І., Кормош Ж. О.</b> МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ПОЛІГЕКСАМЕТИЛГУАНІДІНІЮ .....	58

<b>Климчук В. С., Савчук Т. І., Мазуренко І. В., Корольчук С. І., Супрунович С. В., Кормош Ж. О.</b>	
ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНІ СЕНСОРИ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ КОРДІАМІНУ .....	59
<b>Мудрик Г. М., Савчук Т. І., Мазуренко І. В., Корольчук С. І., Супрунович С. В., Кормош Ж. О.</b>	
МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ВІТАМІНІВ ГРУПИ В .....	61
<b>Ритікова А. О., Савчук Т. І., Мазуренко І. В., Корольчук С. І., Супрунович С. В., Кормош Ж. О.</b>	
МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ТЕТРАЗОЛІВ .....	64

## **ВПЛИВ ДЖЕРЕЛ ІОНІЗУЮЧОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ НА РЕЧОВИНУ**

## **THE IMPACT OF IONIZING RADIATION SOURCES ON THE MATTER**

---

<b>Renata Majgier, Magdalena Biernacka, Arkadiusz Mandowski</b>	
INVESTIGATION OF OPTICALLY STIMULATED LUMINESCENCE DECAYS FOR BETA-IRRADIATED KCl AND NaCl .....	67
<b>Березюк Г. І.</b>	
МОДЕЛІ БАГАТОФОКУСНИХ СТРУКТУР І РУХОМИХ НЕЛІНІЙНИХ ФОКУСІВ .....	70
<b>Лебедь О. О., Мислінчук В. О.</b>	
ВИЗНАЧЕННЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ РАДОНУ-222 В ПРИРОДНИХ ДЖЕРЕЛАХ ВОДИ ЗДОЛБУНІВСЬКОГО РАЙОНУ РІВНЕНЩИНИ .....	73
<b>Ойович М. Д.</b>	
СУЧАСНІ СЕНСОРИ РАДІАЦІЙНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ .....	74

## **ОДЕРЖАННЯ ТА ВЛАСТИВОСТІ ТВЕРДОТІЛЬНИХ МАТЕРІАЛІВ**

## **OBTAINING OF SOLID-STATE MATERIALS AND THEIR PROPERTIES**

---

<b>Neonila Bozhko, Iryna Polishchuk, Olga Rosolovska</b>	
THERMOELECTRIC PROPERTIES OF PbSe-AgSbSe <sub>2</sub> SOLID SOLUTIONS .....	76
<b>Данильчук С. П., Апшай В. С.</b>	
ОДЕРЖАННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МОНОКРИСТАЛА Ag <sub>2</sub> CdSnS <sub>4</sub> .....	77
<b>Данильчук С. П., Ілюшко Н. В., Герасимюк Ю. А., Божко В. В.</b>	
ТЕРМІЧНО СТИМУЛЬОВАНА ПРОВІДНІСТЬ МОНОКРИСТАЛІВ ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ Tl <sub>1-x</sub> In <sub>1-x</sub> Sn <sub>x</sub> Se <sub>2</sub> (x=0,1-0,25) .....	80
<b>Данілевська Н. Б., Нечипорук Б. Д., Новоселецький М. Ю.</b>	
СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ НАНОЧАСТИНОК СУЛЬФІДУ ЦИНКУ .....	82
<b>Замуруєва О. В., Кадлубицкий А. О., Мирончук Г. Л., Вілюс Вертяліс</b>	
КІНЕТИКА ФОТОПРОВІДНОСТІ В КРИСТАЛАХ Ag <sub>2</sub> In <sub>2</sub> Si(Ge)Se <sub>6</sub> .....	85

<b>Капітула С. Ю.</b> СИНТЕЗ ТА РЕНТГЕНОСТРУКТУРНІ ДОСЛІДЖЕННЯ НАНОЧАСТИНОК ГІДРОКСИДУ КАДМІЮ .....	88
<b>Кримусь А. С., Нігматуліна О. С., Прокопюк Л. Л.</b> ДОСЛІДЖЕННЯ П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНИХ МОДУЛІВ МОНОКРИСТАЛІВ $Ag_xGa_xGe_{1-x}Se_2$ ( $0,167 > x > 0,333$ ) .....	91
<b>Левковець С. І., Андріяшина І. С., Піскач Л. В.</b> ВЗАЄМОДІЯ МІЖ ТАЛІЙ (I) ТА ПЛЮМБУМ (II) БРОМІДАМИ.....	93
<b>Маїло С. В., Денисюк Н. М.</b> ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ $TlPb_2Br_5 -$ $TlPb_2J_5$ .....	95
<b>Маргарян А., Аугустас Некрошюс</b> ФОТОЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ $Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$ ( $x = 0.1; 0.20$ ).....	97
<b>Махновець Г. В., Рижук А. О.</b> ДОСЛІДЖЕННЯ ОПТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МОНОКРИСТАЛІВ $Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$ .....	100
<b>Мельник М., Кримусь А., Василюк М.</b> ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ $Ag_xGa_xGe_{1-x}Se_2$ .....	102
<b>Паліюк О. М., Новосад О. В., Божко Н. А.</b> НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНА ЗАЛЕЖНІСТЬ ЕЛЕКТРОПРОВІДНОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ $Cu_{1-x}Zn_xInSe_2$ .....	104
<b>Піскач Л. В., Фічук К. С., Піскач М. Ф.</b> СИСТЕМИ $TlInS_2(Se_2) - CdS(Se)$ .....	107
<b>Пойман О. М., Новосад О. В., Денисюк М. І.</b> ФОТОПРОВІДНІСТЬ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ $CuInS_2-ZnIn_2S_4$ .....	109
<b>Рудик Б. П., Мороз М. В.</b> МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ РОЗМІРІВ НАНОЧАСТИНОК ОКСИДУ ЦИНКУ АНАЛІЗОМ РЕНТГЕНІВСЬКОГО ПРОФІЛЮ .....	111
<b>Семенюк Т. А., Іщук І. М., Рубчинська М. Л., Кевшин А. Г.</b> ОСНОВНІ УЯВЛЕННЯ ПРО СТРУКТУРУ ОКСИДНИХ ТА ХАЛЬКОГЕНІДНИХ СТЕКОЛ.....	114

# **АВТОМАТИЗОВАНІ СИСТЕМИ ЗБОРУ ДАНИХ ТА КЕРУВАННЯ**

## **AUTOMATED SYSTEMS OF DATA COLLECTION AND MANAGEMENT**

УДК 004.65:004.056

### **KEY PROGRAM INFORMATION SECURITY THREATS IN AUTOMATED DATA COLLECTION SYSTEMS**

**Oleksandr Martyniuk**

Student of Information Security Faculty, Institute of Physics and Technics,  
National Technical University of Ukraine «Kyiv Polytechnic Institute», e-mail: oleksandr\_kyiv@ukr.net

The use of automated data collection systems in the physical experiment made the processing of information more quickly and efficiently. Today the computing power of personal computers allow even complex studies using high-precision sensors and receive full results, analyze and forecast the passage of the physical process that explored. Such systems usually consist of a personal computer system with the system of sensors connected to it and specialized software [1]. Moreover, the software that performs information processing can be created specifically for a particular experiment and developed by the experimenter. Thus automated data collection system can be used in various organizations such as research centers, universities and schools. To share information about the experiment the Internet can be used. This will exchange data between remote systems quickly and analyze even complex physical processes. However, the use of the Internet for experiment data transmission can carry a lot of information security threats. The main ones are discussed further.

Information has three main properties. The first of them is integrity. It provides that the information will not be altered or removed by unauthorized users. The second is privacy, and it will be respected if no user gets access to information, the right to which he has not. The last property - availability - means that anyone, who has the right of access to information, can fulfill legal action in time, not exceeding set [2]. If any one of these properties will not be met, the information will not be protected, and therefore its use in automated data collection system is impossible.

Sources of threats can be internal or external. From this we can draw the following classification of causes of programmatic information security breaches. Internal threats are:

- entering incorrect data;



- errors in the code of software;
- faulty internal access restriction subjects.

External threats:

- malware transmitted through the network or portable storage media;
- scanning Network;
- forwarding incorrect data.

Entering wrong data and error code associated with the fact that the software used in the analysis of the data was poorly tested. The cause of errors can be either data entered by the user or the data submitted with the sensors. To prevent such threats developers should test software and provide memory sizes to be used in their work.

Faulty concurrent access relevant threat have place if the automated system involves the use of certain processes or certain information privileged users. Faulty access can be achieved by selecting passwords, impersonating another user, increasing own privileges. To prevent such type of threat correctly build concurrent access policies must be used, use quality passwords, hide log information onto your computer and use encryption. The last method can adversely affect the performance of the software, but protect from violations of data security.

External threats are more dangerous because it will affect not only the software for processing data, but full automated system. The first and most important of the threats in this case is malware. There are many types of programs that differ in scale negative impacts and methods to the computer and purpose. Malware - this is quite an old concept, understood as such programs or code that aims to obtain sensitive data, obstructing the work of a computer system or gain control over it. Thus the following forms of software include worms, Trojans, adware, viruses, rootkits, key logger and many other extortion or spyware. Compared to other programs that may adversely affect the performance of your computer, such as defective code, which contains errors that could not be eliminated in time during development, malicious software is created deliberately and executes malicious action. "Worms" can bring a lot of damage to the computer and even computer networks, but their purpose is only to abuse the system and its compromise. Ransomware (short for words ransom and software) is a specialized type of malware that aims to get cash benefits in exchange for unlock your computer. Examples of such programs are Cryzip, Rector. Other reasons for the introduction of malware on the computer may be the actual expression, upholding certain personal reasons, dissemination of relevant information, blocking of some services [3]. Using anti-virus software help to prevent negative malicious software. These programs differ in method of finding virus programs, signatures, the spectrum of functions and other features. However, the use of their work on automated data collection systems, especially with Internet access is required.

To counter network scanning and sending incorrect data a firewall should be used. It analyzes the external traffic. So you can block malicious packets, monitor network access by external entities and protect themselves from attacks related to networking. Clearly, for complete protection, you can use comprehensive protection systems, which include antivirus, firewall, additional tools to find vulnerabilities and other extras.

Consequently, the automated data collection system that is composed of a system of sensors connected to a PC with installed specialized software to analyze the data was analyzed. It was the main threat to the security of information systems and generally inherent in such systems and the basic ways to prevent attacks and information security problems were analyzed too.

**References:**

1. Available at: [http://en.wikipedia.org/wiki/Data\\_acquisition](http://en.wikipedia.org/wiki/Data_acquisition).
2. Грайворонський М. В., Новіков О. М. Захист інформації в комп'ютерних системах і мережах / М. В. Грайворонський, О. М. Новіков. - К. : BHV, 2009. - 608 с : іл. - (Інформатика). - ISBN 966-552-167-5 (Ukrainian language).
3. Available at: <http://en.wikipedia.org/wiki/Malware>.

УДК 53.08

## АВТОМАТИЗАЦІЯ КОНДУКТОМЕТРИЧНО-ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНИХ ВІМІРЮВАНЬ ПРИ ДОСЛІДЖЕННІ КАРБОНАТНОЇ ВОДНОЇ СИСТЕМИ

**Гаєвський В. Р.**

кандидат технічних наук, доцент кафедри хімії та фізики

Національного університету водного господарства та природокористування, e-mail: [gvr63@list.ru](mailto:gvr63@list.ru)

Автоматизація експерименту і збору експериментальних даних є важливим елементом сучасних наукових досліджень і особливо для кінетичних фізико-хімічних досліджень у яких необхідно здійснювати неперервний контроль певних фізико-хімічних величин. В даній роботі досліджується чиста карбонатна водна система (КВС), яка утворюється шляхом змішування деіонізованої води з вуглекислим газом ( $CO_2 + H_2O$ ) за допомогою одночасного багатопараметричного приладового контролю (електропровідності, показника іонів водню ( $pH$ ) та температури) [1].

КВС утворюється при взаємодії вуглекислого газу з водою з утворенням вуглекислоти:



яка в подальшому дисоціює за першим і другим ступенями – рівняння (2) і (3):



В процесі дисоціації зміщується кислотно-лужна рівновага, яка буде зміщувати також реакцію дисоціації води (4)



Рівняння (1) – (4) є теоретичною основою КВС, і кількісні співвідношення між компонентами КВС, враховуючи, що система є термодинамічно рівноважною, встановлюються за виразами для термодинамічних констант дисоціації вугільної кислоти по першій та другій ступеням та константи дисоціації води відповідно (5).

$$K_1 = \frac{HCO_3^- \cdot H^+}{CO_2}, \quad K_2 = \frac{CO_3^{2-} \cdot H^+}{HCO_3^-}, \quad K_w = H^+ \cdot OH^-, \quad (5)$$

де  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_w$  - константи дисоціації вугільної кислоти та води. Оскільки КВС є іоногенною системою, то доцільно використати також рівняння електронейтральності (6):

$$C_{H^+} = C_{HCO_3^-} + 2C_{CO_3^{2-}} + C_{OH^-}. \quad (6)$$

Оскільки одна із іонних компонент ( $H^+$ ) вимірюється і рахується відомою, то розв'язуючи систему (5) - (6) по відношенню до незалежного відомого параметра  $H^+$  легко знайти значення іонних компонент КВС, а саме  $HCO_3^-$ ,  $CO_3^{2-}$ ,  $OH^-$  як функцій активностей іонів  $H^+$  і на основі закону Кольрауша про незалежність іонних рухливостей [2], при прямуванні ступеня дисоціації до одиниці (оскільки молярні концентрації менше  $10^{-3}$  моль/дм<sup>3</sup>), рівняння для розрахунку електропровідності системи буде таким:

$$\chi = (C_{HCO_3^-} \cdot \lambda_{HCO_3^-} + 2 \cdot C_{CO_3^{2-}} \cdot \lambda_{CO_3^{2-}} + C_{H^+} \cdot \lambda_{H^+} + C_{OH^-} \cdot \lambda_{OH^-}) \quad (7)$$

де  $C_x$  – концентрація компонента  $X$ , вказаного в індексованій позиції,  $\lambda_x$  - іонна рухливість компонента  $X$ , вказаного в індексованій позиції. Звичайно, таке рівняння є певним наближенням, яке необхідно співставляти з похибками експериментального обладнання.

Оскільки у даних умовах зміни  $pH$  (4...5,5) максимальний вміст  $OH^-$  і  $CO_3^{2-}$  по відношенню до вмісту іонів водню та гідрокарбонат-іонів ( $H^+ + HCO_3^-$ ) не буде перевищувати 0,08 %, їх вкладом в електропровідність можна знехтувати. Враховуючи вище сказане, рівняння електронейтральності для даних умов з похибкою, яка не перевищує 0,1 % буде таким:

$$H^+ = HCO_3^-, \quad (8)$$

і тоді рівняння (7) можна записати у вигляді:

$$\chi = C_{H^+} \cdot (\lambda_{HCO_3^-} + \lambda_{H^+}). \quad (9)$$

де  $C$  – концентрація розчину.

Для даного діапазону концентрацій  $\gamma \approx 1$ , тобто  $a \approx C$ , тоді з (9) отримаємо показник іонів водню, який розраховується за значеннями електропровідності:

$$pH(\chi) = -Lg \left[ \frac{\chi}{(\lambda_{HCO_3^-} + \lambda_{H^+})} \right]. \quad (10)$$

Для виконання експериментів використали спеціально розроблений у фізико-технологічній лабораторії водних систем багатопараметричний аналізатор якості водних систем [1].

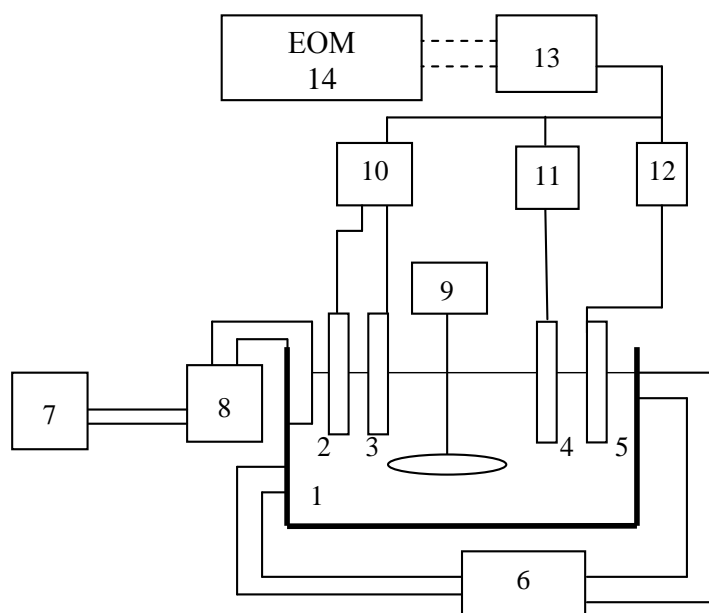


Рис. 1. Блок-схема установки для кондуктометрично-потенціометричних досліджень

постійність його витрати контролюють за допомогою ротаметра 8. Після досягнення концентрації  $CO_2$ , близької до насичення, розчин дегазують, перемішуючи його механічною мішалкою – 9. Сигнал від  $pH$ -електродної пари – 2, 3 і давача температури – 5 надходить на відповідні перетворювачі 10, 12, а від давача електропровідності на прецизійний кондуктометр LM-302

(Німеччина) – 12. Далі, з перетворювачів і кондуктометра, сформовані електричні сигнали надходять на плату АЦП – 13 і записуються у пам'ять комп'ютера – 14. Таким чином, базою даних такого експерименту були значення електропровідності  $\chi$  і  $pH$ . За виміряними значеннями електропровідності розраховано показник іонів водню за співвідношенням (10).

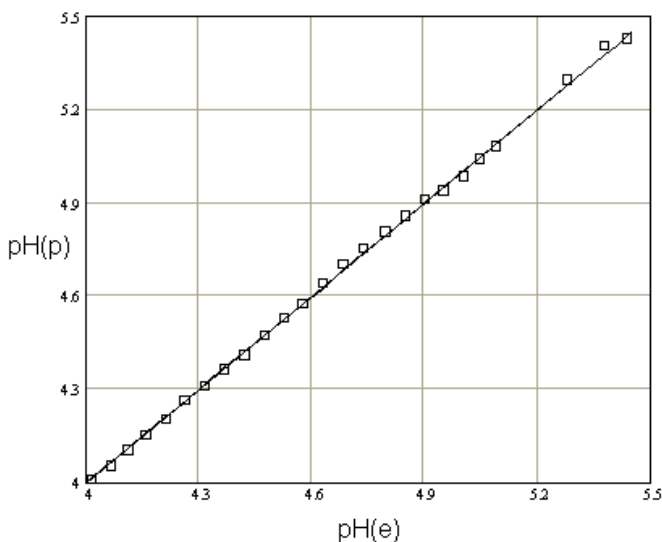


Рис. 2. Залежність розрахованих значень  $pH(p)$  за співвідношенням (19) (неперервна пряма) від значень  $pH(e)$ , вимірянних електродною парою (квадрати)

На рис. 2 порівнюється  $pH(p)$ , розраховане за співвідношеннями (10) (неперервна пряма) та  $pH(e)$ , виміряне електродною парою (квадрати).

Статистична обробка результатів вимірювань методом найменших квадратів, показала, що похибка таких калібрувальних експериментів не перевищує  $\pm 1\%$ .

За результатами даних досліджень запропоновано спосіб калібрування *pH*-давача [3].

**Список літератури:**

1. Гаєвський В. Р. Метрологічні дослідження і випробовування аналізатора водних систем "АКВА". / В. Р. Гаєвський, В. З. Кочмарський // Збірник статей III наук.-техн. конф. УДАВГ. – 1997. – Ч. 5. – С. 7–10.

2. Робинсон Р. А. Растворы электролитов / Робинсон Р. А., Стокс Р. Г. пер. с англ. - М., 1963. – 647 с.

3. Пат. 16786 Україна, G01N27/06. Спосіб калібрування потенціометричного *pH*-давача у діапазоні  $pH\ 4 \div 6$ . / Кочмарський В. З., Гаєвський В. Р. ; заявник і патентовласник Нац. ун-тет водн. госп. та природокорист. – № у 2006 02864 ; заявл. 17.03.2006 ; опубл. 15.08.2006, Бюл. № 8.

УДК 658

## **АВТОМАТИЗАЦІЯ ПОБУДОВИ КУРСУ СИЛОВИХ ТРЕНУВАНЬ В ТРЕНАЖЕРНОМУ ЗАЛІ**

**Сачук М. В.**

студент Рівненського державного гуманітарного університету, e-mail: nicholas.s@mail.ru

В сучасному суспільстві практично все автоматизоване. Машини виконують замість людей безліч різних справ, тим самим полегшують життя люду. Напевно кожен житель сучасного світу не може уявити своє життя без комп'ютера. Навіть у більшості спорт залів адміністратор не заповнює абонемент власноруч, його роботу виконує "научена машина". Вона набагато швидше та надійніше виконує поставлену їй задачу. Доцільно було б розробити програму, яка б замінювала роботу професійного тренера та дієтолога.

Тому актуальною задачею є розробка програмного забезпечення для створення курсу силових тренувань в тренажерному залі.

В роботі розроблено програмне забезпечення, яке за вхідними даними (тип статури, мета тренувань, кількість тренувальних днів) буде автоматично генерувати програму тренувань та спеціально створений під дані тренування раціон харчування. Це дозволить пересічному громадянину розумно та ефективно побудувати графік свої тренувань та режим харчування, який в свою чергу приведе до досягнення очікуваного результату.

**Список літератури:**

1. Василяки А. "Короткий довідник по дієтичному харчуванню / А. Василяки, З. Килиєнко – К. : Жишинів, 1980. – 46 с.

2. Смоляр В. І. Рациональное харчування / В. І. Смоляр – К. : Здоров'я 1991. – 153 с.

3. Вебер М. Избранное. Образ общества / М. Вебер – М. : Мир, 1994. – 194 с.

4. Гурвич М. М. Большая книга о питании для здоров'я / М. М. Гурвич – К. : Эксмо, 2012. – 255 с.

## ВИКОРИСТАННЯ МАТЕМАТИЧНОГО АПАРАТУ НЕЧІТКОЇ ЛОГІКИ В СИСТЕМАХ АВТОМАТИЗОВАНОГО КЕРУВАННЯ

**Сідлецький В. В.**

студент Національного університету водного господарства та природокористування,

e-mail: off.sidletsky@gmail.com

Нечітка логіка зародилася як найбільш зручний спосіб керування складними технологічними процесами і знайшла застосування в побутовій електроніці, діагностичних та інших експертних системах [1]. Використання її елементів у системах автоматизованого керування дає змогу здійснювати керування процесом з більшою точністю та економією ресурсів.

В термінах аристотелевої логіки твердження не може бути одночасно істинним і хибним. Тому для того, щоб істинність чи хибність перестали бути абсолютними, вводять нечітку логіку, яка дає можливість називати твердження частково істинним або хибним.

Таким чином, нечітка логіка сама по собі не сумісна з аристотелевою, особливо по відношенню до закону «*Tertium non datur*» («Третього не дано» – лат.), який також називають законом виключення середнього. Якщо його сформулювати коротко, то він звучить так: якщо ствердження не істинне, то воно хибне.

Нечітка логіка оперує не цифровими, а лінгвістичними поняттями, ключовими серед яких є:

- *фаззіфікація* – перетворення множини значень аргументу ( $x$ ) в деяку функцію належності  $M(x)$ , тобто перевід значень ( $x$ ) в нечіткий формат;
- *дефаззіфікація* – обернений процес до фаззіфікації.

Системи з нечіткою логікою функціонують за наступним принципом: показники вимірювальних пристроїв фаззіфікуються (переводяться в нечіткий формат), обробляються, дефаззіфікуються і потім у вигляді звичайних сигналів подаються на прилади.

В роботі розглянуто процес керування системою вентиляції та кондиціонування на основі нечіткої логіки. Побудову моделі здійснювали в інтерактивній системі Simulink з використанням блоку Fuzzy Logic Controller [2].

Для забезпечення комфортних умов перебування у приміщенні необхідно забезпечити належне регулювання температури та вологості. За даними з приладів у приміщенні знаходять встановлені показники температури та вологості, які регулюються шляхом управління нагрівачами та камерою зрошення у вентиляції (рис. 1).

У даному випадку на fuzzy-регулятор поступають дані вологості та температури у приміщенні (рис. 2), а на виході з нього отримуємо два вихідні сигнали температури першого та другого нагрівачів відповідно (рис. 3).

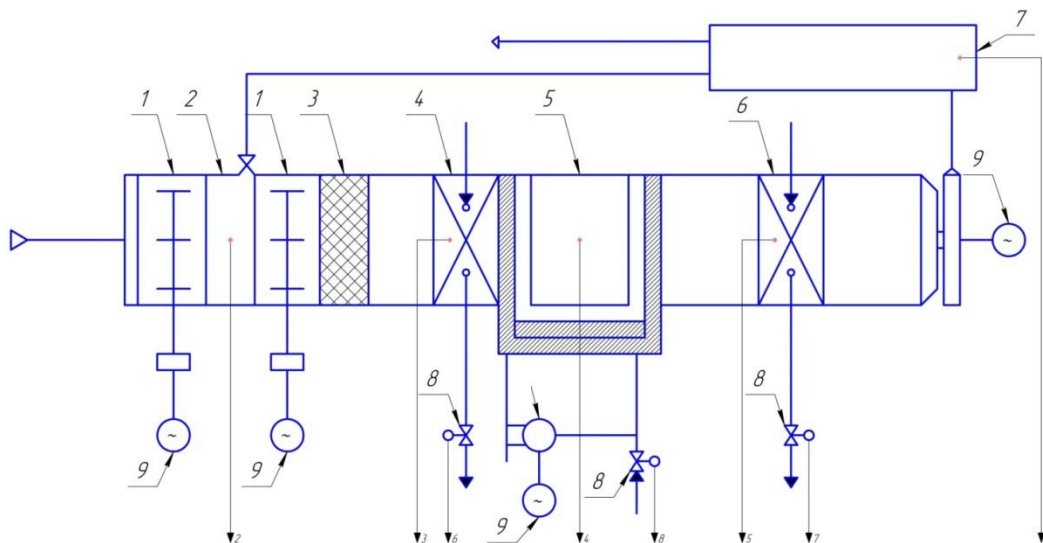


Рис. 1. Функціональна схема системи вентиляції та кондиціонування:

1 – вентилятор; 2 – камера змішування свіжого та рециркуляційного повітря; 3 – фільтр; 4 – камера первинного підігріву; 5 – камера зволоження; 6 – камера вторинного підігріву; 7 – приміщення; 8 – клапан регулювання витрати; 9 – електродвигун.

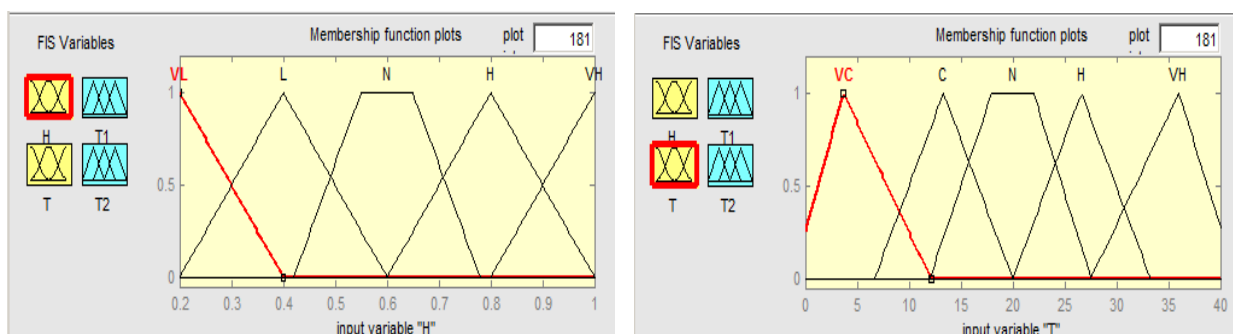


Рис. 2. Діапазон і терми вхідних сигналів

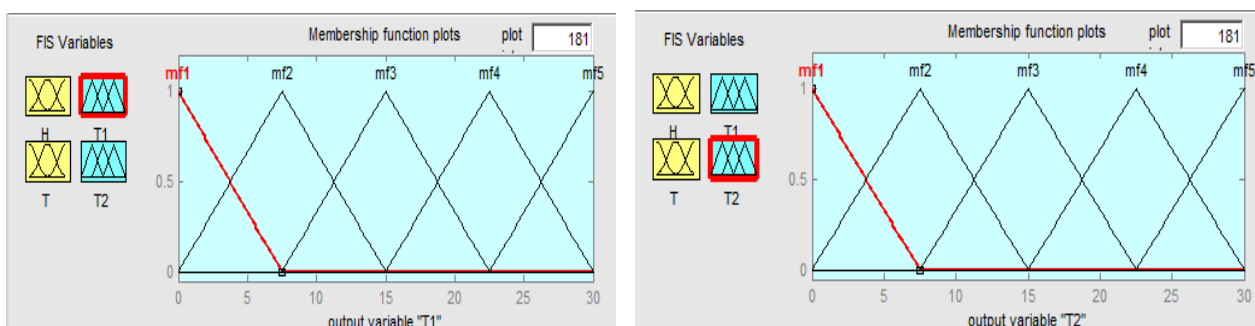


Рис. 3. Діапазон і терми вихідних сигналів

Такого роду умови дозволяють максимально точно регулювати швидкість роботи вентиляційної системи, що забезпечує економічність використання ресурсів.

Записавши лінгвістичні правила для нашої системи, отримали наступне візуальне відображення поверхні правил (рис. 4).

Склавши систему керування у відповідності до всіх розрахованих параметрів та промодельовавши її, отримали перехідні характеристики вологості та температури (рис. 5). Їх порівняння з аналогами, отриманими в системі керування з ПІ-регулятором, показало, що при застосуванні нечіткої логіки, регулювання відбувається більш згладжено та за коротший проміжок часу, що свідчить про більшу ефективність використання саме такої системи керування.

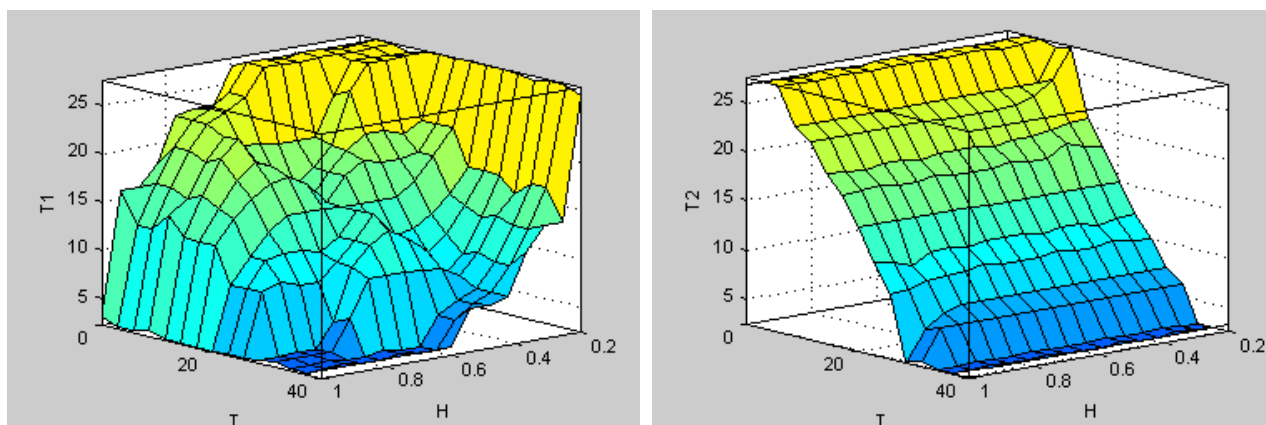


Рис. 4. Візуальне відображення (поверхня) правил

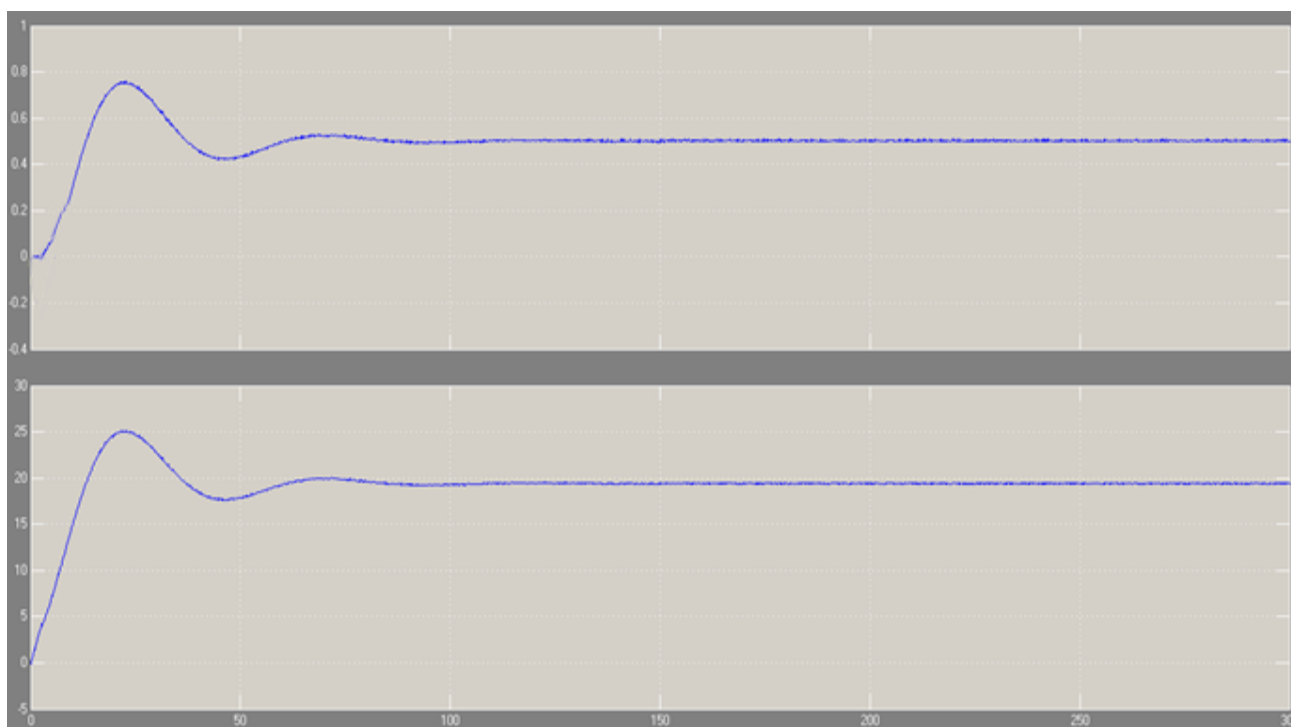


Рис. 5. Перехідні характеристики вологості та температури в системі регулювання з нечіткою логікою

На основі отриманих результатів показано, що системи керування з нечіткою логікою більш раціональні в використанні в системах автоматизації, аніж решта типових систем. Це пояснюється значно точнішим процесом регулювання величин під час модуляції систем та можливістю



покращення процесу керування завдяки більшій гнучкості системи. При цьому використання елементів нечіткої логіки може значно знизити енерговитрати, підняти поріг чутливості системи до зовнішніх збурень, більш точно реагувати на сторонні фактори впливу на систему.

***Список літератури:***

- 1.Круглов В.В. Нечеткая логика и искусственные нейронные сети / В.В. Круглов, М.И. Дли, Р.Ю. Голунов. – М.: Физматлит, 2001.
- 2.Леоненков А.А. Нечеткое моделирование в среде Matlab и fuzzyTech / А.А. Леоненков. – СПб.: БХВ-Петербург, 2005.

# КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

## COMPUTER MODELING

УДК 53.072

### МОДЕЛЮВАННЯ КОНФОРМАЦІЙНОЇ МОБІЛЬНОСТІ МЕЗОГЕННИХ КРИСТАЛІВ

Головіна Н. А.<sup>1</sup>, Аргюх В.О.<sup>2</sup>, Яневич І.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>кандидат фізико-математичних наук, доцент

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: ninaholovina@gmail.com,

<sup>2</sup>студент Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки

Дослідження властивостей рідких кристалів (РК) на молекулярному рівні є актуальними протягом останніх десятиріч. Причому феноменологічні дослідження РК поступаються місцем дослідженням на молекулярному рівні. Такого типу дослідження мають принципове значення як для створення загальної теорії рідкокристалічного стану, так і для розуміння питань теорії фазових переходів. Важливим різновидом фазових переходів є переходи, які супроводжуються змінами конформацій молекул (молекулярний або конформаційний поліморфізм). Якщо явище кристалічного поліморфізму вивчено досить добре, то конформаційний поліморфізм вивчений слабо. Передумовами прояву конформаційного поліморфізму є загальмоване внутрішнє обертання і поворотна ізомерія, властиві складним органічним молекулам. Істотну роль в його виникненні можуть відігравати також внутрішньо- і міжмолекулярні водневі зв'язки в молекулах і асоціатах. Встановлення взаємозв'язку між будовою молекул, їх конформаційними перетвореннями і поліморфізмом кристалів, а також визначення впливу конформацій молекул на характеристики мезофази дозволяє однозначно інтерпретувати, а в ідеалі і прогнозувати фізико-хімічні та термодинамічні властивості РК. Комп'ютерне моделювання конформаційної мобільності мезогенних кристалів поруч із їх спектральними дослідженнями дає можливість розв'язувати поставлені задачі.

Метою роботи є комп'ютерне моделювання конформаційної мобільності, дослідження конформаційного поліморфізму при фазових переходах мезогенних сполук і встановлення взаємозв'язку між кристалічною структурою, конформаціями молекул і мезоморфними властивостями.

В якості основного об'єкта дослідження обрано п'ятий та сьомий гомологи фтор алкіл(циклогексан)карбонових кислот (5ФАЦГКК, 7ФАЦГКК) [1], які проявляють мезоморфні властивості. Рентгеноструктурні та спектральні дослідження цих речовин представлені у [2]. Складна структура молекул дозволила передбачити в цих з'єднань наявність також і конформаційного поліморфізму.

У 5 і 7ФАЦГКК реалізується впорядкована смектична фаза типу Е. На це вказує наявність ряду гострих інтенсивних піків на кривих розсіяння рентгенівських променів в області великих кутів, а також мозаїчна оптична текстура в схрещених поляроїдах, характерна для впорядкованих фаз типу Е. Згідно ІЧ спектральним дослідженням мезофаза характеризується однаковим вмістом циклічних димерів, відкритих асоціатів і мономерів. Фторалкільні групи є причиною утворення пошарової упаковки мезофази, що може бути обумовлено збільшенням енергії бічних взаємодій в шарі, а саме за рахунок утворення міжмолекулярних слабких водневих зв'язків типу C-F ... H-C між атомами фтору кінцевих груп і протонами циклічних фрагментів мезогенів.

Молекули мезофази можуть бути у вигляді мономерів (рис. 1), димерів, утворених водневими зв'язками (рис. 2) та відкритих асоціатів (рис. 3).

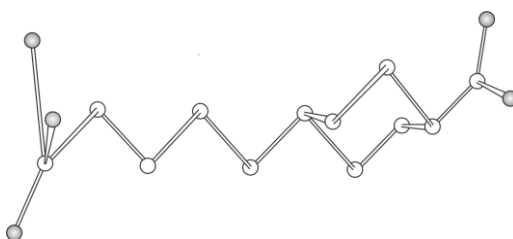


Рис. 1. Мономерна молекула 5ФАЦГКК

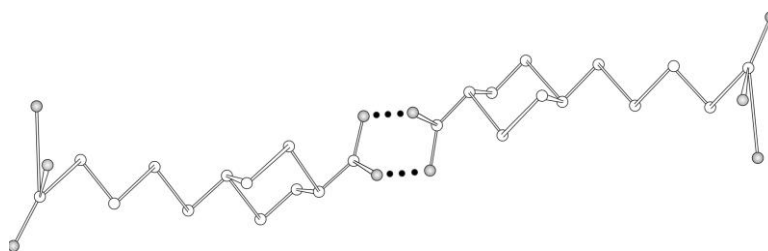


Рис. 2. Молекула-димер 5ФАЦГКК

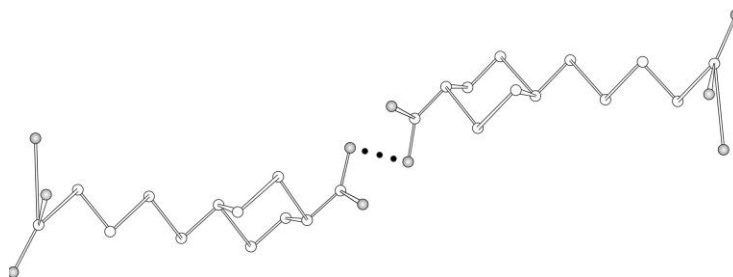


Рис. 3. Відкритий асоціат 5ФАЦГКК

Поведінка характеристичних частот групи C=O в області 1700-1750  $\text{cm}^{-1}$  під час фазових переходів та при розчиненні у  $\text{CCl}_4$  добре корелює з цими міркуваннями. Зокрема, спочатку з молекул-димерів утворюються відкриті асоціати і мезофаза є сумішшю вище приведених варіантів молекул. Відсутність у спектрах розчинів у  $\text{CCl}_4$  смуг молекул - відкритих асоціатів свідчить про те, що циклічні димери є досить стійкими утвореннями. А поява самих відкритих асоціатів, що виникають за рахунок розриву водневих зв'язків у РК фазі, обумовлена особливостями міжмолекулярної взаємодії в цій фазі.

За допомогою комп'ютерного моделювання запропоновано моделі упаковки молекул 5 і 7ФАЦГКК в смектичній фазі. Для 5ФАЦГКК це варіант з перекриванням гнучких "хвостів", а для 7ФАЦГКК можливі два способи укладання молекул - упаковка двохшарового і моношарового типів (наприклад, рис. 4).

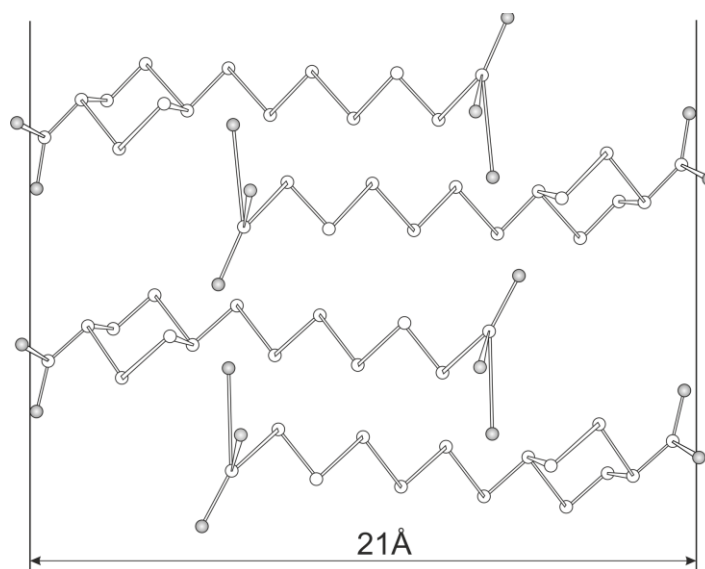


Рис. 4. Упаковка 7ФАЦГКК

Використовуючи графічні програми: CorelDRAW X5, Adobe Photoshop CS6, змодельовано як будова мезофазы циклогексанкарбонових кислот залежить від поведінки системи водневих зв'язків при фазових переходах, від довжини алкільного радикала і ступеня його фторування. Проаналізовано характер міжмолекулярних взаємодій. Досліджено можливість утворення ланцюгових асоціатів за рахунок водневих зв'язків.

#### Список літератури:

- 1.Спектры ИК поглощения и конформационные превращения перфторалкилциклогексанкарбоновых кислот/ Л. М. Бабков [та ін.] // ЖПС. – 1990. – 53, – в.4. – С.617 – 623.
- 2.Жидкие кристаллы, содержащие фтор. Колебательные спектры, структура и полиморфизм перфторалкилциклогексанкарбоновых кислот / Л.М Бабков [та ін.] // Кристаллография. – 1988. – 33, – в.6. – С. 1478 – 1486.

## **ДЕЯКІ АСПЕКТИ МОДЕЛЮВАННЯ У ПРОЦЕСІ НАВЧАННЯ З ВИКОРИСТАННЯМ ІНФОРМАЦІЙНО-КОМУНІКАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ**

**Гриб'юк О. О.<sup>1</sup>, Юнчик В. Л.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>кандидат педагогічних наук, старший науковий співробітник

Інституту інформаційних технологій і засобів навчання НАПН України, e-mail: olenagrybuk@gmail.com,

<sup>2</sup>аспірант Інституту інформаційних технологій і засобів навчання НАПН України, e-mail: uynchik@gmail.com

Підвищення результативності навчання на уроці спостерігається з активним використанням інформаційно-комунікаційних технологій, відповідно впровадження таких засобів у навчальний процес свідчить про розвиток логічного мислення та творчих здібностей школярів. Спостерігаються серед учнів самостійні рішення і виконання необхідних дій, що призводить до розв'язку поставленої задачі, та є реалізацією проблемного підходу у навчанні.

Метою дослідження є використання інформаційно-комунікаційних технологій на уроках природничо-математичного профілю в основній школі.

Задачею школи є підготовка всесторонньо розвиненої, активної особистості, здатної до самостійних досліджень і відкриттів. Така особистість має володіти методами аналізу і синтезу, абстрагування й узагальнення, вмінням доводити і спростовувати, робити правильні висновки, приймати обґрунтовані, раціональні рішення.

Підсилення мотивації навчально-пізнавальної діяльності учнів при навчанні математики можливе завдяки особистості вчителя, правильній постановці цілей навчання, створення сприятливих умов для зацікавленої роботи учнів, формування установок на досягнення успіху [1].

Важливим і поширеним видом розв'язування задач шкільного курсу є математичне моделювання, де дослідження здійснюється з використанням моделі, сформульованої у вигляді математичних виразів.

Під моделлю розуміємо таку розумово-уявну або матеріально реалізовану систему чи фізичний об'єкт, яка відображає та відтворює об'єкт дослідження і здатна замінити його так, що її подальше вивчення та дослідження дає нам нові повідомлення про цей об'єкт. Під моделюванням розуміють процес формалізації фізичного об'єкта, метою якого є створення певного аналогу об'єкта, його моделі, адекватної йому [2].

Математичне моделювання як один з найефективніших методів наукового дослідження, є комплексне дослідження властивостей фізичного об'єкта з допомогою створеної його математичної моделі за допомогою ІКТ, включає в себе наступний ряд етапів [2]: фізична постановка задачі, створення математичної моделі, розробка методу побудови розв'язку моделі,

його алгоритмізації та програмної реалізації за допомогою ІКТ, перевірка математичної моделі на адекватність, дослідження на математичній моделі, перенесення одержаних на математичній моделі даних на фізичний об'єкт, вивчення і використання одержаних даних в практичній діяльності.

На прикладі проілюструємо прийоми й методи математичного моделювання. Побудувати математичну модель біологічного процесу розмноження бактерій, отримати дані про еволюцію цього процесу, можливі варіанти цих змін залежно від початкового стану.

Швидкість поділу бактерій пропорційна кількості бактерій  $N$  у даний момент часу  $t$ . Диференціальне рівняння закону розмноження має такий вигляд:

$$\frac{dN}{dt} = kN,$$

де  $k$  – коефіцієнт розмноження.

Інтегральний закон розмноження бактерій описується такою формулою:

$$N = N_0 e^{kt},$$

де  $N(t=0) = N_0$ . Якщо  $k > 0$ , то бактерії з плином часу зростають,  $k=0$  – залишаються незмінними  $N(t)=N(0)$ ,  $k < 0$  – зменшуються та з часом гинуть.

Блок-схема закону розмноження бактерій має вигляд (див. рис. 1.)

В ході моделювання динаміки процесу розмноження бактерій отримано результати (див. рис. 2.). З початковою чисельністю  $N_0 = 10$ , та початковим терміном 2004 р. результати залежать від коефіцієнту розмноження.

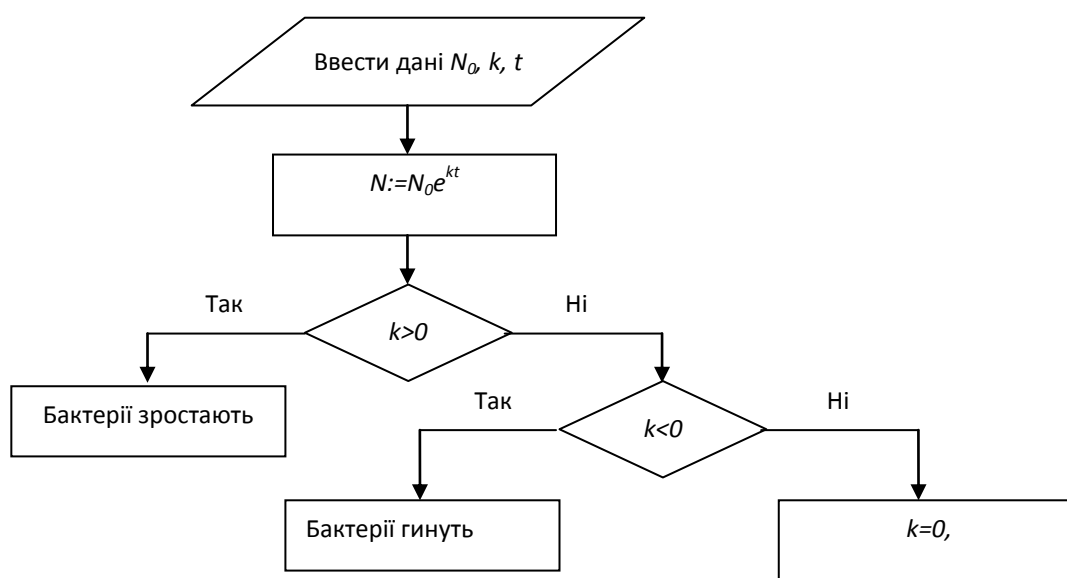


Рис. 1. Блок-схема закону розмноження бактерій

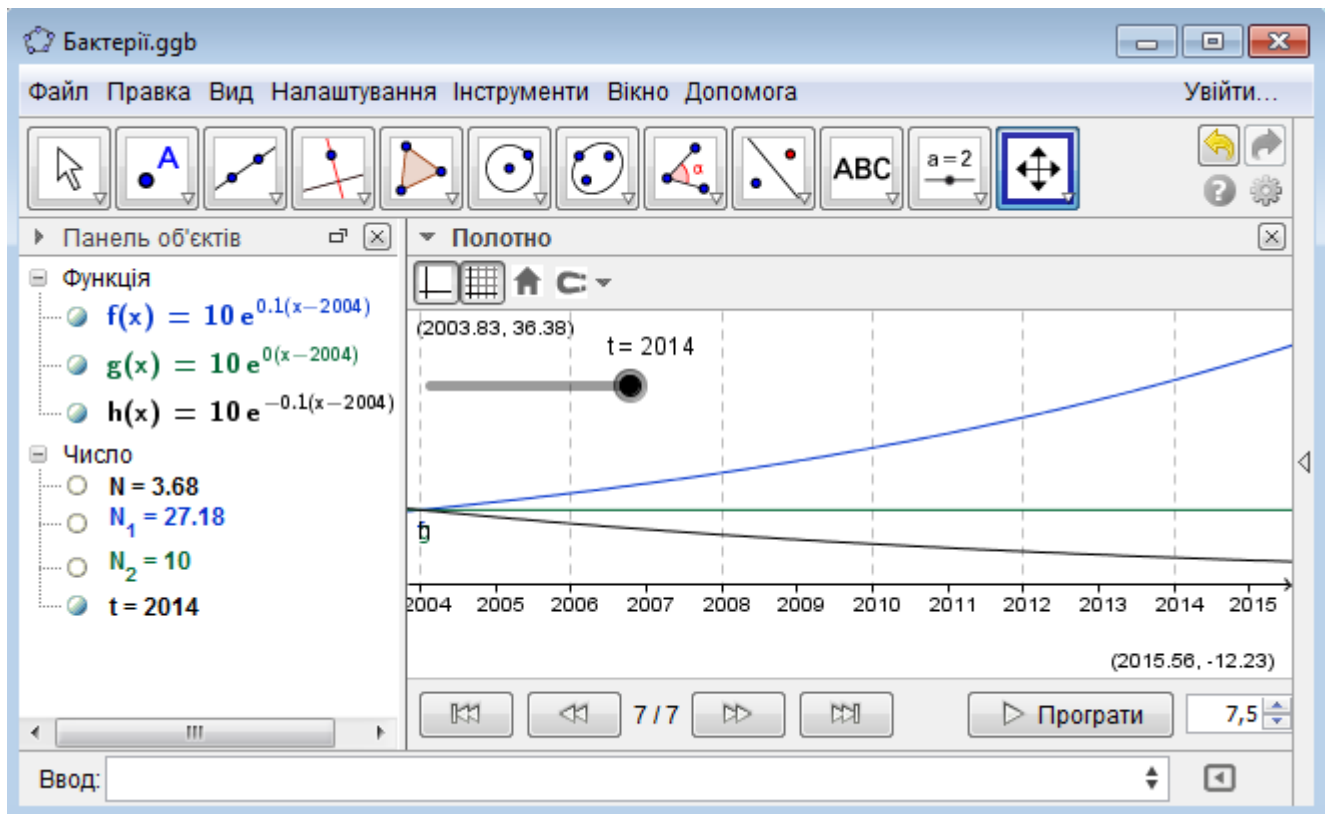


Рис.2. Моделювання динаміки чисельності бактерій

В наш час розроблено та застосовується велика кількість програмних засобів, використання яких дозволяє розв'язувати за допомогою комп'ютера досить широке коло математичних задач різних рівнів складності. Одним з таких програмних засобів є система динамічної математики *GeoGebra*.

*GeoGebra* – вільно розповсюджений пакет комп'ютерної математики, що поєднує можливості динамічної геометрії з аналітичними обчисленнями. Використання даного пакету у процесі навчання математики надає можливість створювати динамічні побудови, а також виконувати такі дії:

1) проводити та документувати різні обчислення: числові (точні, наближені з указаною точністю), аналітичні (дії з алгебричними виразами, розв'язування рівнянь, інтегрування, диференціювання);

2) візуалізувати аналітичні залежності (будувати графіки функцій однієї змінної, криві другого порядку та параметрично задані функції), виконувати статистичне опрацювання результатів експерименту, побудову діаграм та гістограм, а також рисунків за допомогою графічних примітивів;

3) зберігати у файлах, роздруковувати та пересилати по мережі файли з обчисленнями чи графікою;

4) створювати якісну анімацію графічних образів.

*GeoGebra* орієнтована на користувача, який не є професіоналом у галузі програмування, а має тільки базову підготовку [3].

*GeoGebra* має великий набір інструментів для створення динамічних комп'ютерних моделей. На сучасному етапі розвитку шкільної освіти використання комп'ютерних моделей у навчальному процесі є однією з передумов підвищення його результативності. Комп'ютерні моделі можна використовувати з різною метою, а саме [4]: інтерактивні комп'ютерні моделі як динамічні наочні посібники; інтерактивні комп'ютерні моделі, що використовуються для організації евристичного навчання; моделі, що призначені для автоматизації обчислень; інтерактивні комп'ютерні моделі для автоматизації процесу створення навчальних вправ і завдань.

Методична система навчання з використанням моделювання будується на концепціях теорії проблемного навчання та теорії поетапного формування розумових дій, що забезпечує можливість управління навчальною діяльністю і створення орієнтувальної основи дій для розвитку творчих здібностей. Таке навчання забезпечує формування наукового світогляду.

#### **Список літератури:**

1. Психолого-педагогічні вимоги до комп'ютерно-орієнтованих систем навчання математики. / Гриб'юк О.О., Жалдак М.І. // Науковий часопис Національного педагогічного університету імені М.П. Драгоманова. Серія 2: комп'ютерно-орієнтовані системи навчання: Зб. наук. праць – К.: НПУ імені М.П. Драгоманова., 2013. – С. 3 – 19.

2. Гриб'юк О.О. Математичне моделювання як засіб екологічного виховання учнів у процесі навчання математики в класах хіміко-біологічного профілю / О.О. Гриб'юк // Дидактика математики: проблеми і дослідження: Міжнародний збірник наукових робіт. – Вип. 27. – Донецьк.: Фірма ТЕАН, 2007. – С. 132 – 139.

3. Пікалова В. В. GeoGebra. Загальна інформація [Електронний ресурс] / Валентина Валеріївна Пікалова // Кафедра інформатики Харківського національного педагогічного університету імені Г.С. Сковороди – Режим доступу до ресурсу: <http://kafinfo.org.ua/geogebra>.

4. Ракута В. М. Система динамічної математики GeoGebra як інноваційний засіб для вивчення математики [Електронний ресурс] / В. М. Ракута // Інформаційні технології і засоби навчання. – 2012. – Режим доступу до ресурсу: <http://www.journal.iitta.gov.ua>

УДК 004.02:528.7

## **ВЕЙВЛЕТ-АНАЛІЗ СУПУТНИКОВИХ ЗНІМКІВ ЗЕМНОЇ ПОВЕРХНІ**

**Мащенко В. В.**

студент географічного факультету

Київського національного університету імені Тараса Шевченка, e-mail: laiker79@gmail.com

При обробці супутникових зображень земної поверхні є актуальною задача шумоподавлення. Відносно новим є спосіб шумоподавлення за допомогою вейвлет-функцій. Вейвлети дозволяють



аналізувати різні типи сигналів і ефективно усувати шум, тому особливий інтерес представляє дослідження їх можливостей для підвищення якості зображень [].

Вейвлети представлені великим числом базисних функцій, що робить математичний апарат вейвлет-аналізу більш гнучким для представлення і обробки зображень. Зокрема, з його допомогою можуть проводитись дослідження можливостей вейвлет-фільтрів для обробки різних типів зображень.

Серед професійного і найбільш сучасного програмного забезпечення, що здатне розв'язувати досить складні задачі практичного використання вейвлетів і вейвлет-перетворень, можна виділити три основних програмних пакети – Mathcad Professional, MATLAB, Mathematica. Ці програмні комплекси використовуються як для самого аналізу властивостей вейвлет-функцій і вейвлет-перетворень, так і для їх використання в задачах обробки цифрових сигналів і зображень.

Мета роботи – з'ясувати, який тип вейвлетів забезпечує найкращу фільтрацію зображення при різних типах завад і шумів.

Практичну реалізацію фільтрації зображень з різними варіаціями відповідних параметрів проводили в системі MATLAB 7.8. Операцію фільтрації зображень проводили з файлами у форматі \*.mat. Імпорт файлів супутникових знімків, отриманих у форматі \*.jpg (табл. 1) та переведенням у сірій напівтон, проводили за допомогою наступного коду:

```
function [X]=map(f,r,g,b)
% f - назва файлу у форматі *.jpg
A=imread(f);
A=double(A);
Xrgb=r*A(:, :, 1)+g*A(:, :, 2)+b*A(:, :, 3);
NbColors=255;
X=wcodemat(Xrgb,NbColors);
map=gray(NbColors);
end;
```

Значення коефіцієнтів  $r$ ,  $g$ ,  $b$  змінювали в межах від 0,1 до 0,6.

Для фільтрації завад у вигляді хмарності на знімку (1) використовували 7 типів вейвлетів. З їх допомогою відфільтровували завади наперед вибраного полігону (рис. 1) з подальшою декомпозицією двох зображень вибраного полігону, їх накладанням та відновленням. Необхідною умовою даної операції є однаковий розмір зображень.

Таблиця 1. Параметри супутникових знімків

Супутник	Дата зйомки	Роздільна здатність	Хмарність	Кут зйомки	ID	
1	WorldView-2	01.10.2014 12:00	0,46 м	4 %	16 °	10300100370CD200
2	WorldView-2	11.11.2014 12:00	0,46 м	0 %	25 °	1030050035F97E00

Для отримання найкращих результатів фільтрації при підборі деталізуючих коефіцієнтів було прийнято рішення використовувати практично однакові значення для всіх видів вейвлетів, тим самим ми мали змогу встановити дійсні відмінності в результаті використання кожного типу вейвлету.

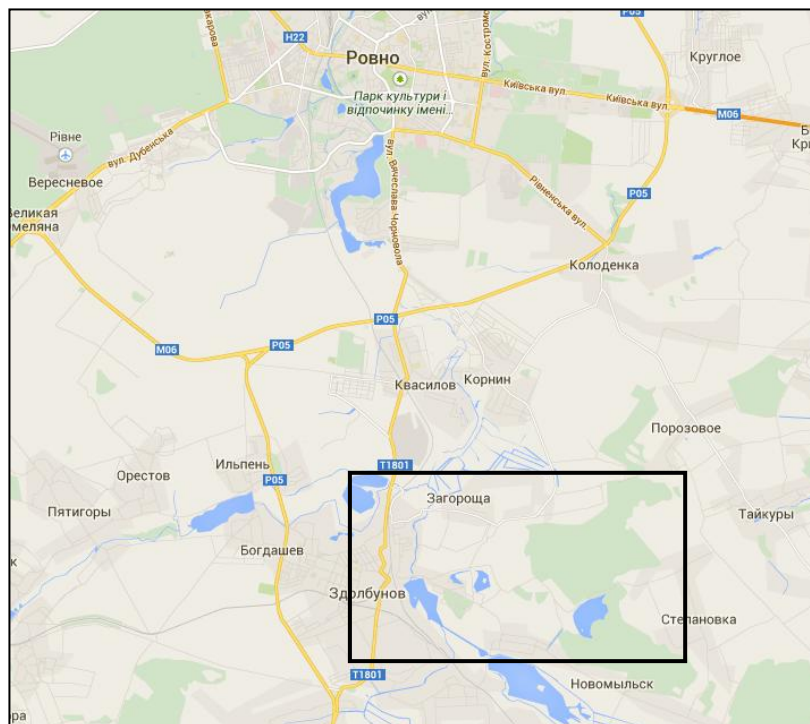


Рис. 1. Полігон на супутникових знімках

Умовно процедуру фільтрації можна розбити на три етапи:

1. Визначення базисного вейвлету, який буде використаний для сепарабельного розкладу, кількості нулевих моментів, а також визначення рівня декомпозиції, при якому буде проводитися даний розклад. На основі вибраних параметрів проводити аналіз зображення, яке складається із сепарабельного двовимірного прямого і оберненого вейвлет-перетворення, в результаті якого ми отримуємо необхідні вейвлет-коефіцієнти. Отримані коефіцієнти в подальшому використовуються для фільтрації зображення.

2. На другому етапі існує можливість зміни кількості вейвлет-коефіцієнтів за трьома складовими: вертикальною, горизонтальною і діагональною на кожному із рівнів декомпозиції.

3. Третій етап – це процес фільтрації, який реалізується за допомогою накладання і відновлення зображень супутникових знімків з хмарністю (1) і без хмарності (2) при визначеному рівні порогової оцінки з використанням GUI-інтерфейсу розширення Wavelet Toolbox системи MATLAB (рис. 2).

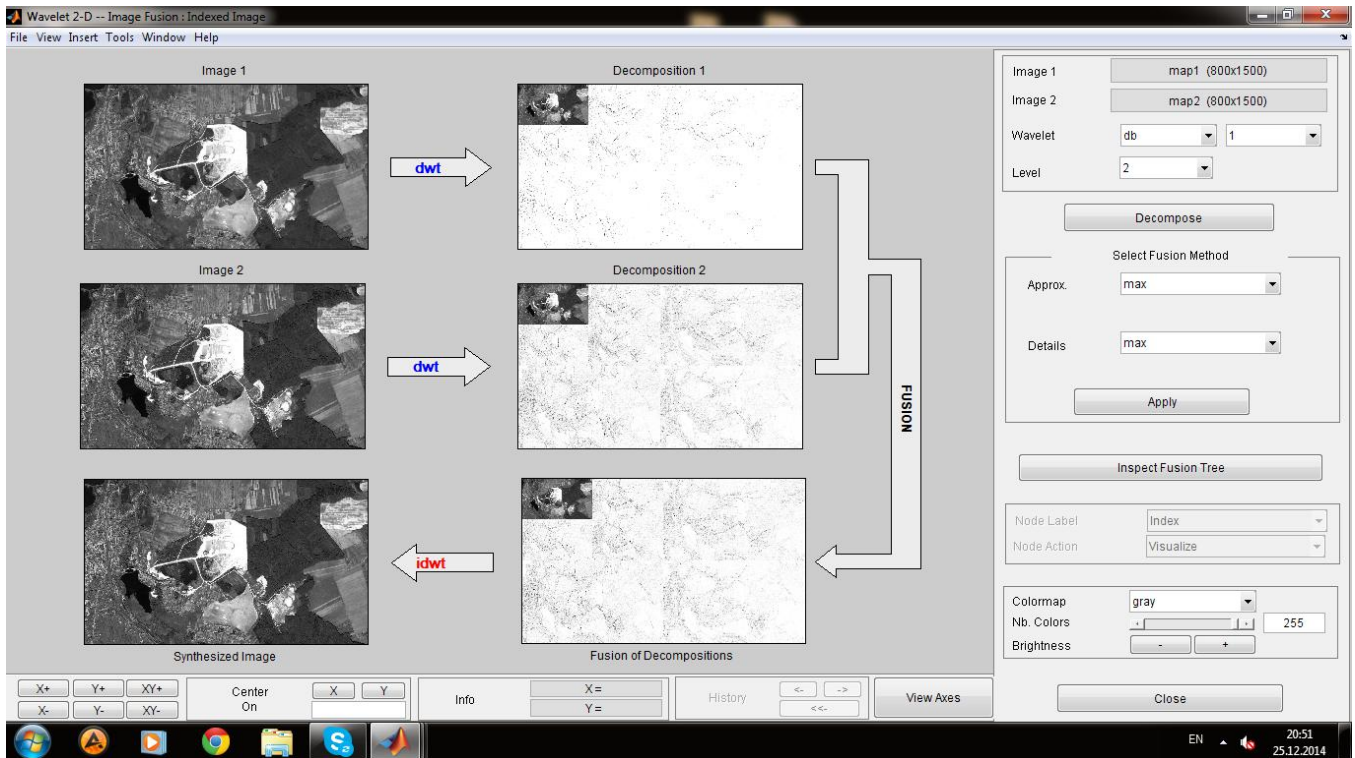


Рис. 2. Вікно розширення Wavelet Toolbox 4.4 системи MATLAB при накладанні і відновленні зображень

В подальшому можемо проводити виділення контурів географічних об'єктів очищеного від завад зображення обраним методом.

В результаті виконаних вейвлет-перетворень імпортованих супутникових знімків встановлено, що для розв'язку задачі фільтрації завад у вигляді хмарності підходять вейвлети Гаара і Добеші. Найкращі показники фільтрації реалізується при глибині розкладу 2-го рівня. Збільшення глибини розкладу перетворення починає формувати згладжену версію вихідного зображення, тобто відфільтровуються не тільки завади, а і деякі локальні особливості об'єктів.

Сукупність проведених операцій дозволяє більш чітко визначити контури географічних об'єктів на супутникових знімках для картографічних і геодезичних задач.

Розглянутий спосіб обробки можна застосовувати при аналізі будь-яких зображень для деталізації об'єктів дослідження.

#### Список літератури:

1. Дьяконов В.П. Matlab. Обработка сигналов и изображений. Специальный справочник / В.П. Дьяконов В.П. – СПб.: Питер, 2002. – 608 с.
2. Воскобойников Ю.Е. Фильтрация сигналов и изображений: Фурье и вейвлет-алгоритмы / Ю.Е. Воскобойников, А.В. Гочаков, А.Б. Колкер. – Новосибирск : Изд-во Новосибирского ГАСУ (СИБСТРИН), 2010. – 195 с.
3. Гонсалес Р., Вудс Р., Эддинс С. Цифровая обработка изображений в среде Matlab / Р. Гонсалес, Р. Вудс, С. Эддинс.– М.: Техносфера, 2006. – 616 с.

## КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НЕЛІНІЙНИХ ПРОЦЕСІВ ВИТІСНЕННЯ НАФТИ ПРИ ПЛОЩОВОМУ ЗАВОДНЕННІ

Якимюк В. О.<sup>1</sup>, Ярощак С. В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>студент Рівненського державного гуманітарного університету, e-mail: vyakimyuk@inbox.ru,

<sup>2</sup>кандидат технічних наук, доцент кафедри інформатики та прикладної математики  
Рівненського державного гуманітарного університету, e-mail: yaroschak@mail.ru

Проблема вибору технологій видобутку нафти та газу при площовому заводненні [1, 2] з складно-структурованих пластів-колекторів в умовах багатофазної фільтрації [2, 3] породженої процесами перерозподілу фаз внаслідок пониження пластового тиску в результаті проведення першої стадії розробки родовищ на фонтануючих режимах свердловин та наступних стадій є складною як з технологічної сторони так і із економічної та потребує комплексного вирішення з залученням сучасних методик видобутку оснований на результатах математичного моделювання відповідних процесів [4–6].

В роботі розвинуто числові методи комплексного аналізу [6–10] стосовно розв'язання плоских задач багатофазної фільтрації при площовому заводненні, на основі яких створено відповідне програмне забезпечення, серед основних функціональних можливостей якого є: побудова гідродинамічних сіток (див. рис. 1), розрахунок полів тиску та насиченості, прогнозування графіків видобутку флюїдів; визначення необхідної кількості свердловин (з паралельним встановленням найкращої схеми їх розміщення); оцінка характеристик ефектів прориву води і вибір методу їх мінімізації; виявлення і оцінка застійних зон; моделювання фільтрації при існуванні тріщин гідралічного розриву (ГРП) [10, 11].

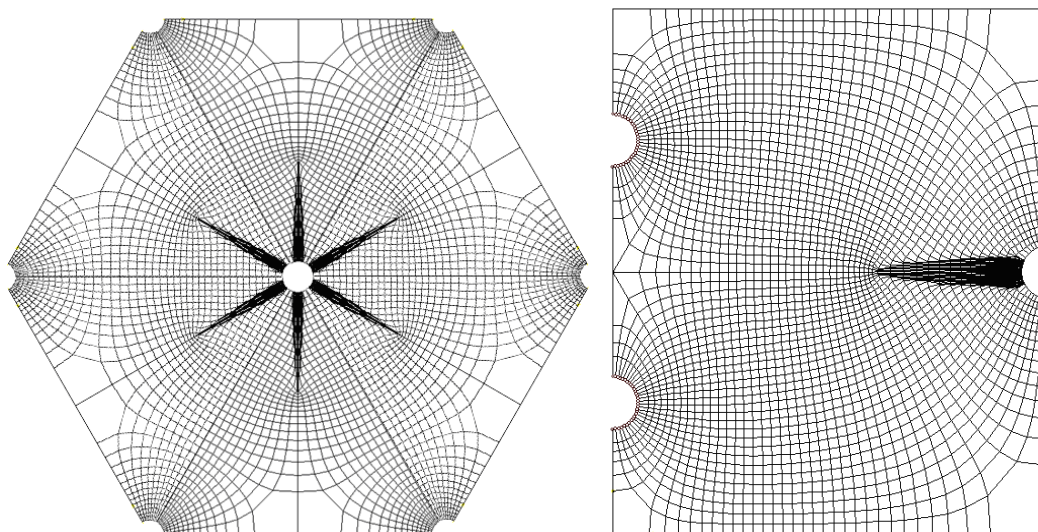


Рис. 1. Гідродинамічні сітки в елементах симетрії систем площового заводнення, при існуванні тріщин ГРП

При цьому користувачу доступна «традиційна» поршнева модель (для побудови наближеної оцінки процесу розробки) та модель фільтрації для гетерогенних флюїдів (з виділенням окремих фаз).

**Список літератури:**

1. Фазлыев Р.Т. Площадное заводнение нефтяных месторождений / Р.Т. Фазлыев. – М. : Ижевск, ИКИ, НИЦ РХД, 2008. – 256 с.
2. Дейк Л. П. Практический инжиниринг резервуаров / Л. П. Дейк. Москва-Ижевск : Институт компьютерных исследований, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2008. – 668 с.
3. Баренблатт Г. И. Движение жидкостей и газов в природных пластах / Г. И. Баренблатт, В. Н. Ентов, В. М. Рыжик. – М. : Недра, 1984. – 303 с.
4. Азиз Х. Математическое моделирование пластовых систем / Х. Азиз, Э. Сеттари. – Москва–Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2004. – 416 с.
5. Zhangxin C. Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media (Computational Science and Engineering) / C. Zhangxin, H. Guanren, M. Yuanle. Paperback. Society for Industrial and Applied Mathematic, 2006. – 531 pp.
6. Bomba A. Ya Complex approach to modeling of two-phase filtration processes under control conditions / A. Ya. Bomba, S.V Yaroschak // Journal of Mathematical Sciences, Vol. 184, No. 1, July, 2012, – P. 56–69.
7. Бомба А. Я. Метод квазиконформних відображень розв'язання модельних задач двофазної фільтрації / А. Я. Бомба, С. В. Ярошак // Доповіді НАН України. 2010. – №10 – С. 34–40.
8. Бомба А.Я. Числовий метод квазиконформних відображень моделювання процесів двофазної фільтрації / А. Я. Бомба, С. В. Ярошак // Обчислювальна та прикладна математика. 2010. – №2.– С. 3–13.
9. Бомба А. Я. Методи комплексного аналізу: Монографія / А. Я. Бомба, С. С. Каштан, Д. О. Пригорницький, С. В. Ярошак. – Рівне: НУВГП, 2013. – 415 с.
10. Бомба А.Я. Комплексне дослідження поведінки системи «свердловина-тріщини» при витісненні однієї рідини іншою у горизонтальному пласті / А. Я. Бомба, А.М. Сінчук, С. В. Ярошак // Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: технічні науки. – Кам'янець-Подільський : Кам'янець-Подільський національний університет, – 2012. – Вип. 6. – С. 11–26.
11. Каневская Р. Д. Математическое моделирование разработки месторождений нефти и газа с применением гидравлического разрыва пласта / Р.Д. Каневская. – М. : ООО "Недра-Бизнесцентр", 1999. – 212 с.

# ФІЗИКО-ТЕХНІЧНІ ПРОБЛЕМИ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА

## PHYSICAL AND TECHNICAL ASPECTS OF MATERIALS SCIENCE

UDC: 538.9:[547+620]

### CHARGE LIFE TIME IN THE TIME OF FLIGHT MEASUREMENTS FOR AROMATIC HYDROCARBONS

**Janusz Kuliński<sup>1</sup>, Sylwester Kania<sup>2</sup>, Piotr Balczewski<sup>3</sup>, Joanna Skalik<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>M.Sc., Centre of Mathematics and Physics, Lodz University of Technology, Poland,  
Ph.D.- student, Jan Dlugosz University in Czestochowa, Poland, e-mail: janusz.kulinski@p.lodz.pl,

<sup>2</sup>D.Sc., Centre of Mathematics and Physics, Lodz University of Technology, Poland,

<sup>3</sup>professor, Ph.D., D. Sc, Environmental Protection and Biotechnology,  
Jan Dlugosz University in Czestochowa, Poland,

professor, Ph.D., D. Sc., Department of Engineering of Polymer Materials,  
Centre of Molecular and Macromolecular Studies, Polish Academy of Sciences, Poland,

<sup>4</sup>D. Sc., Department of Heteroorganic Chemistry,  
Centre of Molecular and Macromolecular Studies, Polish Academy of Sciences, Poland

Understanding of the charge transport process in the thin layers of hydrocarbons is challenging technological problem. In the last decade polymeric materials have shown a great application potential especially in development of optoelectronic elements, such as organic field effect transistors (OFETs) or organic light emitting diodes (OLEDs), organic photovoltaics (OPVs), But equivalently oligomeric and low molecular polycyclic aromatic molecules possess a great potential for applications due to possibility to create stacking systems of  $\pi$ -conjugated bonds what is an origin for obtaining high quality materials [1,2]. Obtaining the reproducible material parameters is facilitated due to strong covalent bonds in the molecule as a whole, and the possibility to control the microscopic structure and mean distance between molecules by a technological regime of preparation of the layer. Helpful is possibility to obtain high purity grade layers without residual traces of solvent.

Anthracene and its derivatives are especially attractive due to high thermal stability, low price and good photoluminescent and electroluminescent properties.

Vacuum evaporation was used to deposit layers of O-benzyl protected diarylmetanols, 10-(benzyloxy)-3-bromo-6,8-dimethoxyanthracene-2-carbaldehyde (mANTRADM) and 10-(benzyloxy)-3-

bromo--6,7,8-trimethoxyanthracene-2-karbaldehyde (mANTRA). These materials were obtained involving Friedel-Crafts intramolecular cyclization [3, 4].

The measuring cells were prepared by vacuum thermal deposition on glass supplied with gold electrode, and then the by vaporization of semitransparent aluminium electrode. . Such a a measuring cell has properties of plate capacitor with the layer of dielectric. For such layers the capacitance was measured with Semi-Automatic RLC Bridge type E314. The width of the layers was evaluated from the capacitance and geometric dimensions of electrodes. Measured layers had the width in the scope of 1 – 14  $\mu\text{m}$ . Electrical characterization was made in two stage, first stage:verification the voltage of filling traps from the characteristics points of U-I characteristics and in the second stage: I-t transients were checked. Measurements of the transient currents were made with the set - up described in detail in [5,6]. Test apparatus was consisted of measuring cell in the Faraday Cage supplied with a quartz window, noiseless direct current supplier, fast ORIEL UV flash lamp:  $\tau=1,6 \mu\text{s}$ , or fast high-pressure Werre - Quartz halogen lamp type VQX 107:  $\tau=5\mu\text{s}$ , and computer with interface and monitor. Typicall oscillograph records are presented in Fig 1. for both measured materials. Time response of the electrical system was transformed into double logarithmic scale, and the transit time ( $t_{tr}$ ) was obtained as a intersection point of the slopes according to the Scher-Montroll model [7] (see insert in the Fig.1b). Absence of the clear dependence  $\tau$  on the voltage (Fig.2) approved the assumption, that the measured characteristic time is a life time of the current carriers [6,7]. The results are presented in the Table1. Making use of Einstein dependence, and approximation that the life time can be considered as volume life time [9] the evaluated mean electron mobility were: for mANTRA:  $1 \cdot 10^{-1} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ , and for mANTRADM :  $0,6 \cdot 10^{-1} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ , and the mean hole mobility were: for mANTRA:  $5,8 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ,and for mANTRADM :  $2,5 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ .

Table1. Charge life time for mANTRA and mANTRADM layers.

material	electron life time [ $\mu\text{s}$ ]	hole life time [ $\mu\text{s}$ ]
mANTRA	$(0,05 \pm 0,2) \cdot 10^3$	$(0,32 \pm 0,07) \cdot 10^3$
mANTRADM	$(0,14 \pm 0,05) \cdot 10^3$	$(0,36 \pm 0,03) \cdot 10^3$

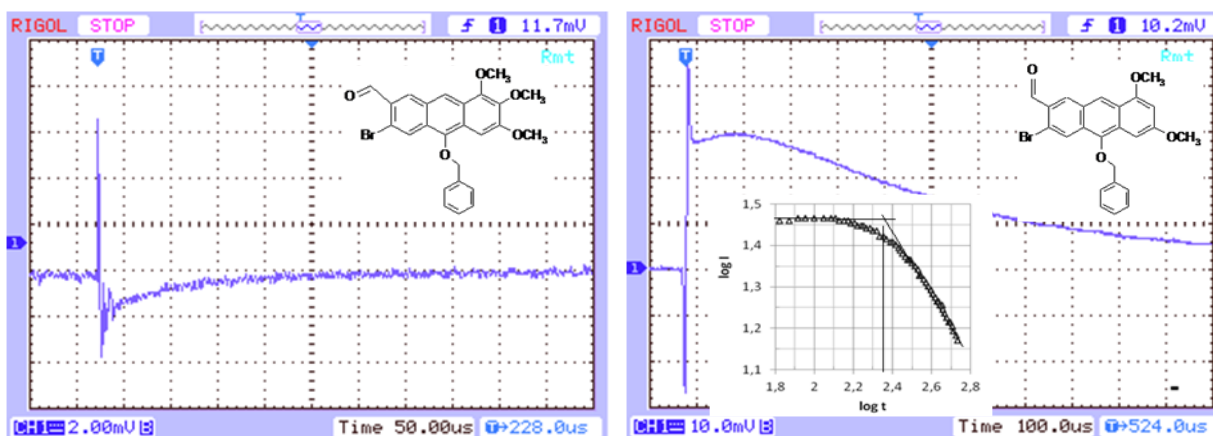


Fig. 1 Time of flight current: a). mANTRA ( $U=30\text{V}$ ,  $L=6\mu\text{m}$ ), b) mANTRADM ( $U=150\text{V}$ ,  $L=8,3\mu\text{m}$ ), insert shows a log - log plot of transient current. The transit time( $t_{tr}$ ) is defined as indicated in the figure .

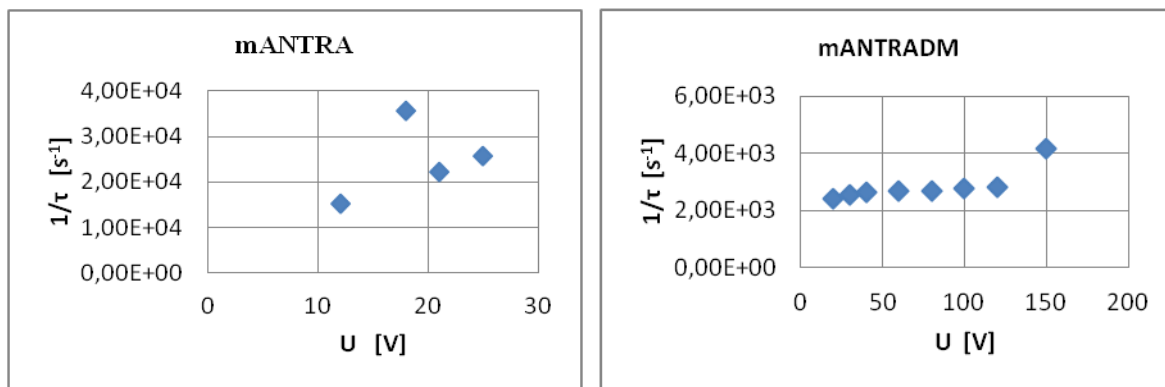


Fig.2 Inverse transit time as a function of applied bias for mANTRA ( $L=6 \mu\text{m}$ ) and mANTRADM ( $L=8,3 \mu\text{m}$ ).

#### References:

1. Di C., Zhang F., and Zhu D.; Adv. Mater. **25**, 313-330,(2013)
2. Zhong C., , Huang F., Cao Y., Moses D., and Heeger A. J., Adv. Mater. **26**, 2341-2345,.( 2014)
3. Bodzioch A., Marciniak B., Różycka-Sokołowska E., Jeszka J. K., Uznański P., Kania S., Kuliński J., Balczewski P., *Chem.Eur. J.*, **18**, 4866-4877, (2012),.
4. Balczewski P., Bodzioch A., Skalik J., CHEMIK, **66**, 1, 11-20, (2012).
5. Kania S., Kuliński J., Chem. Met. Alloys, **4**, 31-37(2011).
6. Kania S., Kondrasiuk J., Bąk G.,W., Eur. Phys. J. E., **15**. 439-442, (2004).
7. Scher H., Montroll E., W., Phys. Rev . B, **12**, (6), 2455-2477 (1975).
8. H Fritsche, Proc. Int. Summer School on Semiconductors, ESPOO, Helsinki, , p. 2. 1982.
9. Kania S., Dłużniewski M., Diamond & Related Materials, **14**, 74-77(2005).

УДК - 535

## ОСОБЛИВОСТІ КРАЮ ОПТИЧНОГО ПОГЛИНАННЯ МОНОКРИСТАЛА $\text{Tl}_3\text{PbI}_5$

Денисюк Н. М.<sup>1</sup>, Хижун О. Ю.<sup>2</sup>, Мирончук Г. Л.<sup>3</sup>, Парасюк О.В.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>аспірант Інституту проблем матеріалознавства НАН України, e-mail: denisyuck.natalia@yandex.ru,

<sup>2</sup>доктор фізико-математичних наук, Інститут проблем матеріалознавства НАН України,

<sup>3</sup>кандидат фізико-математичних наук, доцент, факультет фізики

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: g\_mironchuk@ukr.net

<sup>4</sup>кандидат хімічних наук, доцент, факультет неорганічної та фізичної хімії

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: oleg@univer.lutsk.ua

Потрійні галогенідні кристали, що містять іони свинцю, розглядаються наразі дослідниками надзвичайно перспективними матеріалами для їх застосування в якості ефективних середовищ лазерів, котрі працюють у інфрачервоному діапазоні довжин хвиль. Одним із факторів, який стимулював останнім часом широке дослідження таких кристалів, - необхідність отримання



вичерпної інформації про їх електронну структуру та особливості хімічного зв'язку в них. Нецентросиметрична кристалічна структура сполуки  $Tl_3PbI_5$  вирізняє її в якості дуже перспективного матеріалу для застосування у нелінійній оптиці, вузькосмугових оптичних фільтрів, люмінофорів, модуляторів, дефлекторів, тригерів, і т.д.

Існування сполуки  $Tl_3PbI_5$  було вперше виявлене при вивченні псевдо-бінарної системи  $Tl-PbI_2$  [1,2]. Виявилось, що вищевказаний йодит в нормальних умовах ізоструктурний броміду  $Tl_3PbBr_5$ . В роботі [3] було встановлено, що  $Tl_3PbI_5$  - напівпровідник з шириною забороненої зони 2,5 еВ при кімнатній температурі. Сполука  $Tl_3PbI_5$  може бути ефективно легована іонами рідкоземельних елементів [4,5]. Було встановлено, що  $Tl_3PbI_5$  плавиться конгруентно при температурі 639 К [6]. Авторами роботи [7] було встановлено, що  $Tl_3PbI_5$  кристалізується в орторомбічній кристалічній структурі (просторова група  $P2_12_12_1$ ) з наступними параметрами ґратки:  $a = 16,205 \text{ \AA}$ ,  $b = 9,676 \text{ \AA}$  і  $c = 8,952 \text{ \AA}$ . Необхідно зазначити, що сполука  $Tl_3PbI_5$  володіє хорошою прозорістю в діапазоні від 0,52 до 40 мкм [1]. Цей факт свідчить про велику перспективність її застосування в якості ІЧ-світлодіодів.

Йодиди талію і свинцю отримували прямим методом синтезу в замкнутих вакуумних кварцових контейнерах. Синтез проводили в два етапи: локальним нагріванням в полум'ї газового пальника з наступною гомогенізацією в електропечах при температурах на 50-70 К вище температури плавлення бінарних йодидів. Йодид талію додатково очищали зонною плавкою, а йодид свинцю – дворазовою вакуумною сублимацією. Відпал тривав 100 годин. Піч охолоджували до кімнатної температури протягом 240 годин. Отримані монокристалічні блоки цілком придатні для фізичних вимірювань. Відомо, що бінарні галогеніди сильно токсичні речовини, тому їх синтез здійснюється в спеціальному ізольованому боксі. Ущільнення ампули для очищення і росту кристалів було зроблено в сухому боксі із застосуванням індивідуальних методів захисту.

Для низькотемпературних досліджень використовували кріостат типу «Утрекс»; точність стабілізації та вимірювання температури складала  $\pm 0,5\text{K}$ .



Рис. 1 Фотографія монокристалу  $Tl_3PbI_5$ , який використовувався в оптично-спектральних дослідженнях

Вимірювання спектрів поглинання є одним з прямих методів дослідження енергетичного спектру електронів в напівпровідниках. Змінюючи енергію фотонів, можна селективно збуджувати локалізовані і нелокалізовані стани електронів, і тим самим досліджувати їх енергетичний спектр в широкому інтервалі енергій. В нашій роботі досліджено оптичне поглинання напівпровідникового монокристалу  $Tl_3PbI_5$  в межах 1-2,5 еВ енергій квантів падаючого світла. Спектральні дослідження краю поглинання проводили в інтервалі температур  $100^{\circ}$ - $300^{\circ}$  К.

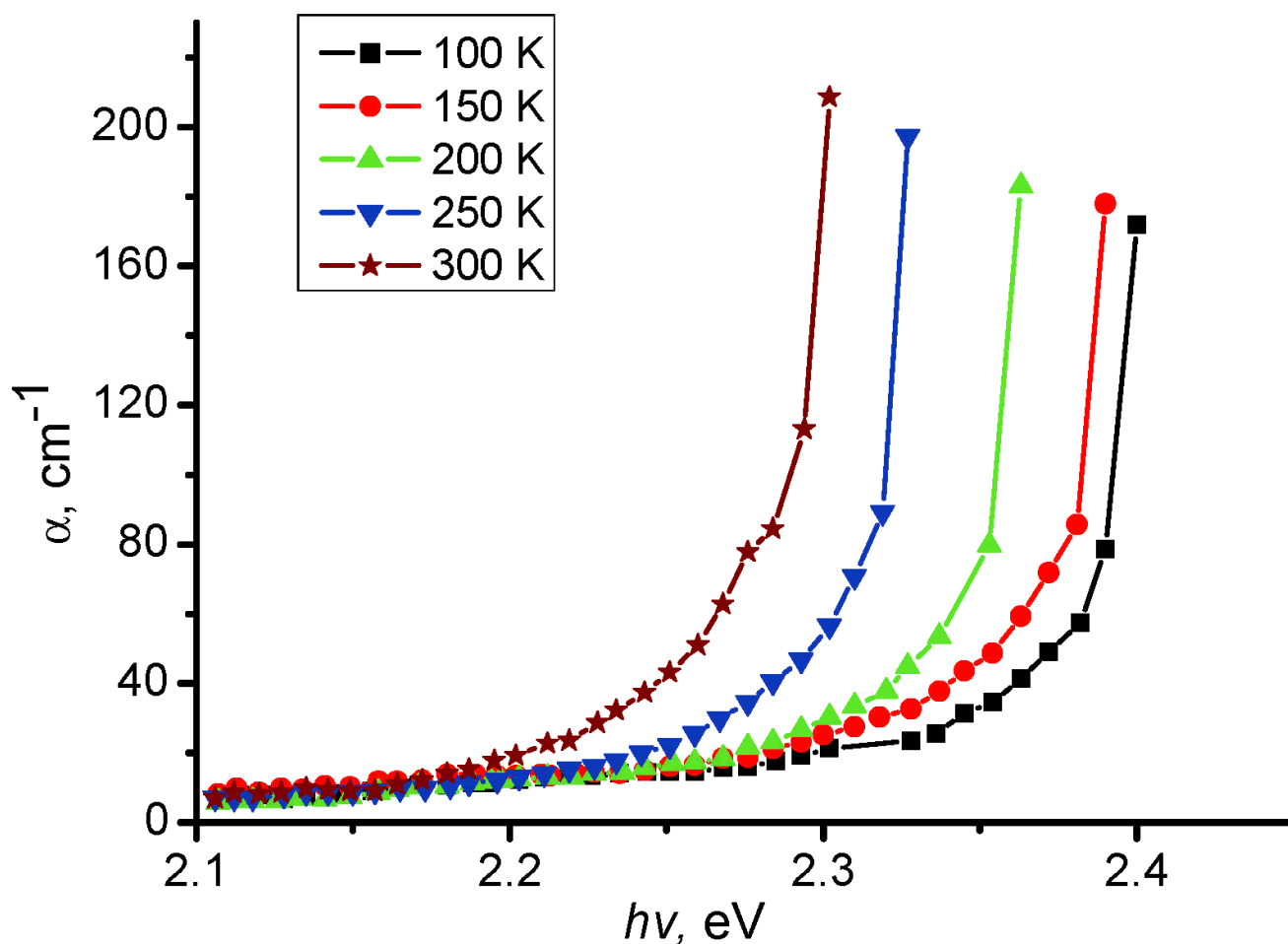


Рис. 2. Спектри оптичного поглинання монокристалу  $Tl_3PbI_5$

Отримані значення коефіцієнта поглинання  $\alpha$  від енергії фотонів  $h\nu$  і температури  $T$  показані на рисунку 2. З наведених залежностей видно, що з підвищенням температури спектри поглинання зміщуються в довгохвильову область, причому нахил спектральних залежностей залишається незмінним. Як видно із рисунка 2, для монокристалу  $Tl_3PbI_5$  при всіх температурах видно різкий ріст коефіцієнта поглинання  $\alpha$  із збільшенням  $h\nu$ , який обумовлений дозволеними прямими переходами електронів із максимуму валентної зони в мінімум зони провідності поблизу енергії 2,3 еВ. Ширина забороненої зони  $E_g$  визначалась по енергетичному положенню довгохвильового краю спектру поглинання за методикою [3].

З експериментальних кривих (рис. 2) побудовано залежність  $h\nu(T)$ , в якій енергію фотонів отримували при перерізі кривих поглинання на рівні  $\alpha = 160 \text{ cm}^{-1}$  (рис. 3).

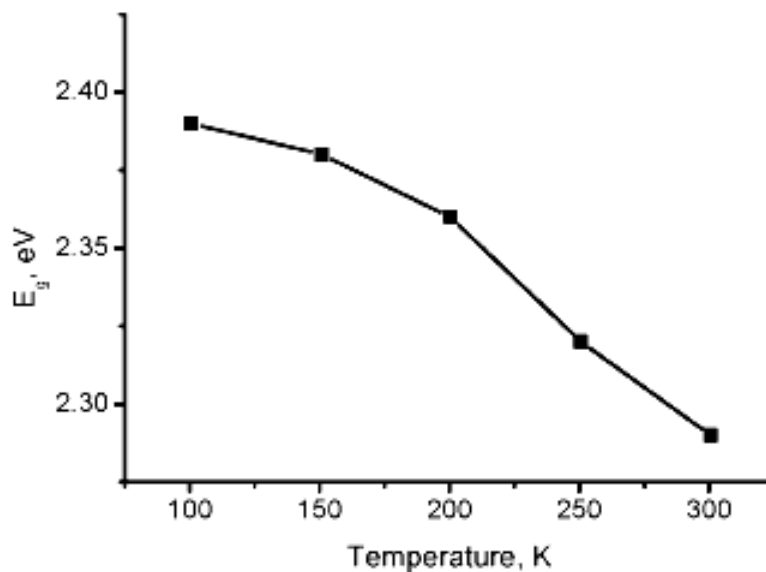


Рис. 3. Залежність краю оптичного поглинання від температури для монокристалу  $Tl_3PbI_5$

Шляхом екстраполяції лінійної ділянки залежності  $\alpha(h\nu)$  до нуля поглинання ( $\alpha = 0$ ) були визначені експериментальні значення оптичної ширини забороненої зони досліджуваного монокристала  $Tl_3PbI_5$ . Виявилось, що значення  $E_g$  знаходиться в межах 2,29-2,39 еВ (рис.2). Отримані нами значення  $E_g$  для сполуки  $Tl_3PbI_5$  добре узгоджуються з літературними даними [6].

#### Список літератури:

1. E. Yu. Peresh, V. B. Lazarev, V. V. Tsigika, Y. V. Voroshilov and V. S. D'ordyai, Zh. Neorg. Khim., 1980, 25, 1368.
2. A. Rabenau and R. Kniep, Z. Anorg. Allg. Chem., 1987, 533, 219.
3. A. A. Fedonyuk, PhD thesis, Volyn National University, Lutsk, 1998.
4. A. Ferrier, M. Velarquez, J. L. Doulan and R. Moncorger, J. Lumin., 2009, 129, 1905
5. M. Velarquez, A. Ferrier, J. L. Doualan and R. Moncorger, in *Solid State Laser*, ed. A. H. Al-Khursan, InTech, Rijeka, Croatia, 2012, pp. 119–142.
6. E. Yu. Peresh, V. B. Lazarev, V. V. Tsigika, Y. V. Voroshilov and V. S. D'ordyai, Zh. Neorg. Khim., 1980, 25, 1368
7. I. D. Olekseyuk, G. E. Davidyuk, A. A. edonyuk, L. V. Sysa and A. M. Padalko, *Inorg. Mater.*, 1998, 34, 445.

## МОДЕЛЮВАННЯ ПЛАЗМОВИХ ПРОЦЕСІВ В РЕЛАКСАЦІЙНІЙ ОПТИЦІ

**Клюйко В. Г.**

спеціаліст кафедри теоретичної та математичної фізики

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: valentina-klujjko@rambler.ru

Плазма може виступати в ролі сильного оптичного середовища. Різні оптичні ефекти в плазмі, такі як генерації гармонік, параметричне підсилення були передбаченні ще в 60-х роках [1]. Однак, експериментально ці ефекти цілеспрямовано не вивчалися до 70-х. Велика активність в цій області розвинулась, після того, як була визнана важлива роль в майбутній техніці лазерного термоядерного синтезу. В цих умовах розуміння механізму оптичних ефектів в плазмі виявляється необхідним, оскільки вони впливають на процес лазерного нагріву плазми. Ми розглянемо основи теорії взаємодії лазерного випромінювання з плазмою.

Ми узагальнимо формалізм з урахуванням затухання плазми і застосуємо його для довохкомпонентної плазми.

Щільності електронів і іонів у плазмі рівні

$$N_e(r, t) = N_{e0} + \rho_e, \quad N_i(r, t) = N_{i0} + \rho_i. \quad (1)$$

Динамічні рівняння, які описують плазму – це, по-перше, рівняння неперервності для електронів і іонів

$$\begin{aligned} \partial \rho_e / \partial t + \nabla(N_e \mathbf{v}_e) + v_e \rho_e &= 0, \\ \partial \rho_i / \partial t + \nabla(N_i \mathbf{v}_i) + v_i \rho_i &= 0. \end{aligned} \quad (2)$$

по-друге, рівняння руху для електронів й іонів.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{v}_e}{\partial t} + (\mathbf{v}_e \cdot \nabla) \mathbf{v}_e &= -\frac{1}{m_e N_e} \frac{\partial p_e}{\partial \rho_e} \nabla \rho_e + \frac{q_e}{m_e} \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v}_e \times \mathbf{B} \right), \\ \frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} + (\mathbf{v}_i \cdot \nabla) \mathbf{v}_i &= -\frac{1}{m_i N_i} \frac{\partial p_i}{\partial \rho_i} \nabla \rho_i + \frac{q_i}{m_i} \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v}_i \times \mathbf{B} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Отримана система рівнянь разом з рівняннями Максвелла формально описують всі можливі оптичні ефекти в ідеалізованій плазмі. На практиці для відносно високочастотних оптичних полів членом  $(q_i/m_i)[\mathbf{E} + \mathbf{v}_i \times \mathbf{B}/c]$  можна знехтувати через велику величину маси іона. В цьому випадку плазма збуджується за рахунок електричної і сили Лоренца, діючих на електрон. Відгук іонів на зовнішнє поле виявляється зв'язним з віддачею електронів в основному через взаємодію з полем в відповідності з законом Гаусса

$$\nabla \cdot E = 4\pi(\rho_e q_e + \rho_i q_i) \quad (4)$$

В плазмі існують плазмові хвилі, які являються колективними збудженнями електронів і іонів плазми. Оптичні ефекти можуть бути викликані взаємодією світлових хвиль з плазмовими [2].

В плазмі можуть відбуватися чотирьоххвильові змішані й інші оптичні процеси третього порядку. Деякі з них зв'язані з індукованим оптичним полем зі зміною показника заломлення плазми.

Більш реалістичний розгляд, коли плазма представляється як однорідна середовище, а нелінійний приріст до показника заломлення зв'язаний з механізмом електрострикцій в неоднорідному полі. В залежності від принципу мінімуму вільної енергії в системі електрони й іони перерозподіляються таким чином, щоб показник заломлення в областях з більшою інтенсивністю поля. Лазерний нагрів плазми також може викликати зміну показника заломлення, який описується членом  $(\partial n / \partial T) \Delta T$ ,  $\Delta T$  залежність від інтенсивності лазерного випромінювання. Цей лазерно-індукований тепловий ефект підсилює електрострикції, оскільки він призводить до розміщення плазми і, отже, до збільшення показника заломлення в області з більшою інтенсивністю лазерного випромінювання [3].

Ситуація з експериментальною частиною складніша від теоретичної, тому що реальна плазма дещо відрізняється від ідеальної.

Для ширшого розуміння взаємодії лазерного випромінювання необхідно знати початкові параметри плазми: ступінь її іонізації, розподілення електронної та іонної щільності, розподілення температури і тощо [4].

Для можливості коректної інтерпретації даних лазерний імпульс повинен мати чітко визначену форму і профіль поперечного розділення інтенсивності. В цьому випадку належним чином отриманні експериментально результати можна порівнювати з результатами чисельного розв'язку системи рівнянь для зв'язаних хвиль [5].

Оптичні процеси, безсумнівно, грають важливу роль при лазерному стиску мішені в експериментах по лазерному термоядерному синтезу. Саме вони визначають ефективність вкладу енергії в мішень. Доволі значиму їх роль в процесах генерації УФ та рентгенівського випромінювання в лазерно-індуктивній плазмі.

#### **Список літератури:**

1. Kroll N., Rostoker N. Theory of the Unmagnetized Plasma / N. Kroll, N. Rostoker // Phys. Rev. Lett., 1964.-V. 13.– 83p.
2. Spitzer L. Physics of Fully Ionized Gases / L. Spitzer // N.Y.: Interscience, 1961
3. Max C. E. Physics of the Coronal Plasma in Laser Fusion Targets / C. E. Max // Phys. Fluids., 1976.-V. 19 – 74p.
4. Brown F., Parks R. E., Sleeper A. M. Nonlinear optical reflection from a metallic boundary / F. Brown, R. E. Parks, A. M. Sleeper // Phys. Rev. Lett., 1965.-V. 14. – 1029p.
5. Bloembergen N., Chang R. K., Jha S. S., Lee C. H. Optical second harmonic generation in reflection from media with inversion symmetry/ N. Bloembergen, R. K. Chang, S. S. Jha, C. H. Lee // Phys. Rev., 1968.-V. 174. – 183p.

## МОДЕЛІ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ПЕРЕХОДІВ В $Er^{3+}$ АКТИВОВАНИХ СКЛОПОДІБНИХ СПЛАВАХ СИСТЕМИ $Ag_{0,05}Ga_{0,05}Ge_{0,95}S_2 - Er_2S_2$

**Скарвінко А. Р.<sup>1</sup>, Каштан М.**

студент Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

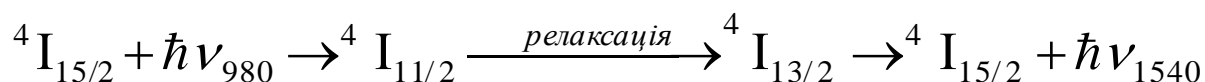
e-mail: <sup>1</sup>nastia-skarvinko@ukr.net

Протягом останніх років інтенсивно досліджуються сульфідні склоподібні сплави. Вони особливо цікаві для можливого застосування в фотонних пристроях, лазерах, підсилювачах світла, ап-конверторах і т. п.. В сульфідних стеклах поєднується низька енергія фотонів, широке вікно прозорості в видимому та інфрачервоному спектральному діапазоні, високий показник заломлення та порівняно висока розчинність рідкоземельних елементів в склоподібній матриці сплаву. Змінюючи компонентний склад скло утворюючої матриці, можна одержати середовище, яке для  $Er^{3+}$  іонів сприятиме підвищенню ефективності фотолюмінесценції (ФЛ).

Серед сульфідних стекол, які активовані ербієм, найбільше уваги приділяють дослідженню люмінесцентних властивостей системи Ge – S – Ga в спеціальному інтервалі 1,45 – 1,65 мкм. Під впливом середовища (скло утворюючої матриці) енергетичні рівні в 4f – оболонці іона ербію розщеплюються на сукупність підрівнів (Штарківське розщеплення), впливаючи як на ширину так і на інтенсивність люмінесценції. Змінюючи компонентний склад склоутворюючої матриці, можна одержати середовище, яке для  $Er^{3+}$  іонів сприятиме підвищенню ефективності фотолюмінесценції.

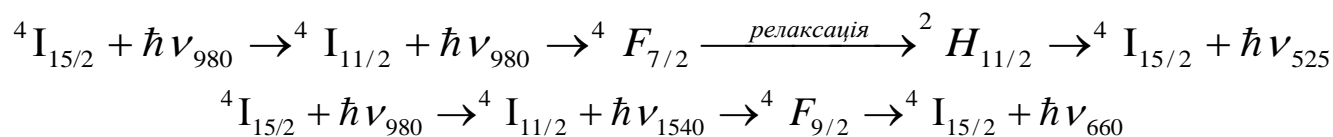
Синтез сплавів проводиться з високочистих елементів (Ag – 99,997 мас.%, Ga – 99,997 мас.%, Ge – 99,997 мас.%, S – 99,999 мас.%) у вакуумованих ампулах, виготовлених з тонкостінного кварцового скла. З системи  $Ag_{0,05}Ga_{0,05}Se_2 + GeS_2 \rightleftharpoons Ag_{0,05}Ga_{0,05}S_2 + GeSe_2$  ми вибрали склоподібний  $Ag_{0,05}Ga_{0,05}Ge_{0,95}S_2$ , який характеризується найбільшим вікном прозорості, порівняно з іншими стеклами цієї системи [1].

При збудження склоподібних сплавів системи  $Ag_{0,05}Ga_{0,05}Ge_{0,95}S_2 - Er_2S_3$  довжиною хвилі 980 нм виявлено фотолюмінесценцію в спектральному діапазоні 1450 – 1650 нм [2]. Цей процес можемо представити з допомогою наступної моделі енергетичних переходів:

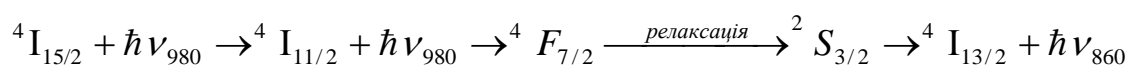


Крім того, збудження цією довжиною хвилі дозволяє спостерігати випромінювання ФЛ у видимій ділянці спектр. Яскраве свічення зразків зеленого і червоно кольору, яке збуджувалося Інфрачервоним лазером (980 нм), можна було спостерігати неозброєним оком. Дослідження

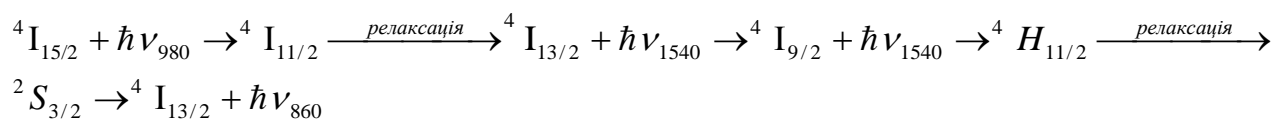
спектрів ФЛ в діапазоні 400-900 нм виявили смуги випромінювання, що відповідають таким максимумами: 525, 660, 860 нм. Максимуми відповідають переходу іона  $\text{Er}^{3+}$  в основний стан, а саме:  ${}^2\text{H}_{11/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$ ,  ${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$ . Поглинання, та випромінювання світла добре демонструють наступні моделі енергетичних переходів:



Як бачимо, перехід  ${}^2\text{H}_{11/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$  відбувається із поглинанням двох фотонів із довжиною хвилі світла 980 нм. Всі вказані моделі енергетичних переходів відповідають переходам іона  $\text{Er}^{3+}$  в основний  ${}^4\text{I}_{15/2}$  стан. Проте випромінювання із максимумом 860 нм, згідно із діаграмою енергетичних рівнів в іоні  $\text{Er}^{3+}$ , не може бути представлений як перехід в основний стан. Вважаємо, що такий перехід може відбуватись згідно із наступними моделями:



або за моделлю, яка включає декілька безвипромінювальних релаксацій до нижчого енергетичного рівня:



Ми надаємо перевагу останній моделі, оскільки час життя носія на рівні  ${}^4\text{I}_{13/2}$  на два порядки перевищує час життя на рівні  ${}^4\text{I}_{11/2}$ . Тому ймовірність поглинання фотона  $\hbar\nu_{1540}$  на рівні  ${}^4\text{I}_{13/2}$  набагато вища як ймовірність поглинання  $\hbar\nu_{980}$  на рівні  ${}^4\text{I}_{11/2}$ .

Вказані моделі енергетичних переходів дозволять краще зрозуміти механізми випромінювальної рекомбінації стекел, які активовані рідкоземельними іонами при створенні активних середовищ в оптичних підсилювачах та мікролазерах.

#### Список літератури:

1. Halyan V.V. Glass formation region and X-ray analysis of the glassy alloys in  $\text{AgGaSe}_2+\text{GeS}_2 \rightleftharpoons \text{AgGaS}_2+\text{GeSe}_2$  system / Sem. phys, quantelect. and optoelect./ V.V. Halyan, M.V. Shevchuk, G.Ye. Davydyuk, S.V. Voronyuk, A.H. Kevshyn, V.V. Bulatetsky. – 2009. - Vol.12, №2. - P. 138-142.
2. Halyan V.V. Photoluminescence in Er-doped  $\text{AgGaS}_2-\text{GeS}_2$  glasses / Phys. Status Solidi C./ V.V. Halyan, A.H. Kevshyn, Yu.M. Kogut, G.Ye. Davydyuk, M.V. Shevchuk, V. Kazukauskas, A. Ziminskij. – 2009. - Vol.6, №12, - P. 2810–2813.

## ЗВ'ЯЗОК ДЕЯКИХ НЕЛІНІЙНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ КРИСТАЛІВ З ЇХ СТРУКТУРОЮ

Столярчук О. К.<sup>1</sup>, Шаварова Г. П.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>студент Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

e-mail: aleksa1994o@ukr.net,

<sup>2</sup>кандидат фізико-математичних наук, доцент

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

e-mail: gannashavaro@ukr.net

Однією з актуальних проблем матеріалознавства є створення оптичних середовищ з певним комплексом властивостей для ефективного використання в нелінійній оптиці. Розглянути механізми виникнення нелінійних явищ та дослідити вимоги до кристалічних речовин, в яких вони найкраще проявляються, є метою цієї роботи.

У лінійній оптиці діє принцип суперпозиції, відповідно до якого дві хвилі не змінюються і не розсіюються при їх накладанні. Параметри оптичних середовищ не залежать від інтенсивності світла. Нелінійні оптичні явища пов'язані з порушенням принципу суперпозиції. Причиною цього є нелінійна поляризація середовища. В лінійній оптиці вектор поляризації  $P$  пропорційний до напруженості електричного поля  $E$ .

$$P = \varepsilon_0 \chi E \quad (1)$$

При великих інтенсивностях світла коливання валентних електронів під дією електромагнітного поля хвилі стають ангармонічними. Дипольний момент при великих відхиленнях не пропорційний силі. Вектор поляризації речовини у такому випадку можна розкласти у ряд Тейлора за степенями  $E/E_a$  ( $E_a$  –напруженість внутрішньоатомного електричного поля):

$$P = \varepsilon_0 (\chi E + \chi^{(2)} E^2 + \chi^{(3)} E^3 + \dots) \quad (2)$$

Діелектрична сприйнятливість  $\chi^{(i)}$  різко зменшується зі збільшенням  $i$  [1]:

$$\chi^{(1)} \approx 1, \chi^{(2)} \approx 10^{-12} \text{ м/В і } \chi^{(3)} \approx 10^{-21} \text{ м}^2/\text{В}^2.$$

Кожен доданок формули (2) відповідає за певні нелінійні явища (генерацію вищих гармонік, сумування та віднімання частот, самофокусування, параметричні ефекти та ін.). В ізотропних середовищах та кристалах з центром інверсії усі парні доданки рівні 0. Тому в таких речовинах неможлива, наприклад, генерація другої гармоніки, але можлива третьої. Як показують



експерименти, хвиля другої гармоніки, яка збуджується у середовищі, поляризованому хвилею основної частоти, в загальному випадку має іншу площину поляризації. Це свідчить про те що діелектрична сприйнятливість в кристалах має тензорний характер. Практично усім речовинам, у яких відбувається генерація другої гармоніки, властиве подвійне променезаломлення. Тому компоненти дипольних моментів на вибрані головні напрями в кристалі є тензорами:

$$P_i = P_i^{(\omega)} + P_i^{(2\omega)}, \quad i=1,2,3, \quad (3)$$

$$\text{де } P_i^{(\omega)} = \chi_{ij}^{(\omega)} E_j^{(\omega)}, \quad i,j=1,2,3, \quad P_i^{(2\omega)} = \chi_{ijk}^{(2\omega)} E_j^{(\omega)} E_k^{(\omega)}, \quad i,j,k=1,2,3,.$$

Компоненти тензора нелінійної поляризації задовольняють умови симетрії кристалічної решітки. Наприклад для калію дигідрат фосфату (КДП) з точковою групою  $\bar{4}2m$  тензор коефіцієнтів нелінійної поляризації має вигляд [2]:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \chi_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\chi_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \chi_{36} \end{bmatrix} \quad (4)$$

Розв'язуючи рівняння Максвела з нелінійним вектором поляризації методом теорії збурень, у першому наближенні одержимо хвилю з частотою, вдвічі більшою, ніж у первинній хвилі. Проте генерація в середовищі другої гармоніки не завжди призводить до поширення ефективної хвилі. У лінійній оптиці частоти, а отже і фазові швидкості ( $v_\phi$ ) первинної і вторинної хвиль однакові, вторинні хвилі інтерферують з первинною і між собою. Якщо частоти хвиль різні, то внаслідок дисперсії ( $v_\phi(\omega)=c/n(\omega)$ ) вторинні хвилі, що виникли у різних точках середовища, будуть мати різні фази і не будуть когерентні між собою. У такому випадку передача енергії від первинної хвилі до вторинної неможлива. Максимальна потужність результуючої хвилі досягається за умови фазового синхронізму:  $n(2\omega)=n(\omega)$ . Для ізотропних речовин, зважаючи на дисперсійну криву, одна з частот має лежати у прозорій області, інша в області сильного поглинання. Тільки в анізотропних кристалах поверхні показників заломлення звичайного ( $n_o(\omega)$ ) і незвичайного ( $n_e(2\omega)$ ) променів, сфера та еліпсоїд відповідно, можуть перетинатись у певних напрямках. Це відбувається лише тоді, коли еліпсоїд достатньо витягнутий, тобто різниця показників заломлення  $n_y-n_z$  велика.

Збільшити її можна шляхом утворення твердих розчинів на основі нелінійних сполук. Наприклад, для чистих кристалів  $\text{AgGaSe}_2$  (просторова група  $\bar{4}2d$ )  $n_y-n_z$  становить  $4.08 \cdot 10^{-2}$  [3]. Введення  $\text{GeSe}_2$  збільшує двоприменезаломлення, яке стає достатнім для досягнення фазової узгодженості при візуалізації випромінювання  $\text{CO}_2$ -лазера. Для  $\text{AgGaGe}_9\text{Se}_{20}$  при  $\lambda=0.7$  мкм  $n_y-n_z$  становить  $43.1 \cdot 10^{-2}$ . В монокристалах  $\text{Ag}_x\text{Ga}_x\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_2$  істотно зменшується коефіцієнт поглинання

порівняно з вихідними сполуками. Стійкість до лазерного випромінювання збільшується від 5 МВт/см<sup>2</sup> для AgGaSe<sub>2</sub> до 50 МВт/см<sup>2</sup> для Ag<sub>x</sub>Ga<sub>x</sub>Ge<sub>1-x</sub>Se<sub>2</sub> (0.12≤x≤0.4) [4]. Більша променева міцність дасть можливість проводити перетворення частоти при більш високих енергіях накачки. Зростання двопронезаломлення пов'язане зі зниженням симетрії структури від тетрагональної до ромбічної. В останній можна виділити окремі фрагменти тетраедричного характеру, перехрещені майже під прямим кутом і розділені порожніми тетраедрами Se<sub>4</sub>. Зі зростанням вмісту GeSe<sub>2</sub> у координаційну сферу статистичних сумішей (Ga, Ge) входить більше атомів Se. Шари атомів селену стають усе більш ізольованими, міжатомні віддалі в них вирівнюються [5], вони чергуються з хвилеподібними ланцюгами тетрадрів. У такій структурі сила хімічних зв'язків (отже і власні частоти коливань атомів) всередині шарів і перпендикулярно до них істотно відрізняються, тобто зростає n<sub>γ</sub>-n<sub>z</sub>. Зв'язки послаблюються, що збільшує поляризованість.

Інтенсивність вторинної хвилі пропорційна інтенсивності первинної. Тому для одержання конверсії частоти використовують потужне лазерне випромінювання, часто в імпульсному режимі. Під дією електромагнітної хвилі можуть утворюватися центри забарвлення, які поглинають випромінювання, температура кристала зростає, що викликає його руйнування. Найбільш стійкі нелінійні матеріали витримують опромінення до 300-400 МВт/см<sup>2</sup>.

Таким чином, нелінійні кристали для конверсії частоти повинні мати: низьку симетрію, велике подвійне променезаломлення, високу променева міцність, однорідність і чистоту. З огляду на це, перспективними нелінійними матеріалами є тверді розчини на основі хімічних сполук.

#### **Список літератури:**

1. Беспалов В. І., Пасманик Г. А. Нелінійна оптика. М.: "Наука", 1980
2. Горбань І.С. Оптика. К.: вид. Вища школа. 1979 р.
3. Boyd G.D., Kasper H.M., McFee J.H., Strong F.G. Linear and nonlinear optical properties of some ternary selenides // IEEE J. Quant. Electron.- 1972.- V.QE-8, № 12.- P. 900-908.
4. Бадиков В.В., Тюлюпа А.Г., Шевырдяева Г.С., Шеина С.Г. Твердые растворы в системах AgGaS<sub>2</sub> - GeS<sub>2</sub>, AgGaSe<sub>2</sub> - GeSe<sub>2</sub> // Неорг. матер.-1991.- №2.-С. 248-251.
5. Олексеюк И.Д., Давидюк Г.Е., Богданюк Н.С., Божко В.В., Шаварова А.П., Горгут Г.П. Получение и свойства монокристалла Ag<sub>0.12</sub>Ga<sub>0.12</sub>Ge<sub>0.88</sub>Se<sub>2</sub> // Изв. РАН. Неорг. матер. - 1993.- Т. 29, № 5.-С.617-619.

# ФІЗИКА КОНДЕНСОВАНОГО СТАНУ

## PHYSICS OF THE CONDENSED STATE

УДК 538.9

### ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ В УЛЬТРАХОЛОДНИХ ФЕРМІ-ГАЗАХ

Вовчук Г. В.<sup>1</sup>, Шигорін П. П.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>магістр кафедри теоретичної та математичної фізики

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: galochka.vovchuk@mail.ru,

<sup>2</sup>кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної та математичної фізики

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: pashyh@gmail.com

З моменту відкриття Бозе-Айнштайнівської конденсації (БАК) в захоплених хмарах бозе-атомів лужних металів в 1995 р. [1] з'явилося багато можливостей для фундаментальних досліджень прояву квантових ефектів на макроскопічному рівні. Перше покоління дослідників при вивченні БАК виявили колективні ефекти в цих надзвичайно розріджених системах (надплинність, колективні коливання і їх затухання, асиметрія вільного розширення тощо) і визначили напрямки для майбутніх досліджень. У даний час увага дослідників зосереджена на пошуку нових макроскопічних квантових явищ в ультрахолодних фермі-газах, що захоплені в магнітну пастку.

Квантові вироджені фермі-гази принципово відрізняються від бозе-газів. Відповідно до принципу Паулі, у випадку тотожних ферміонів не більше ніж одна частинка може займати даний квантовий стан. Для фермі-частинок числа заповнення квантових станів рівні одиниці для енергій, близьких до енергії Фермі  $T_F$ , і дорівнюють нулю при великих енергіях. Енергія Фермі в просторово-однорідному випадку дається співвідношенням:

$$T_F = \hbar^2 (6\pi^2 n)^{2/3} / 2m,$$

де  $n$  – густина газу, і  $m$  – маса атома.

Макроскопічні квантові явища у вироджених фермі-газах проявляються у вигляді надпровідності Бардіна-Купера-Шриффера (БКШ) і пояснюються утворенням куперівських пар. Притягання між частинками пояснюється тим, що при досить низьких температурах, частинки з протилежними імпульсами на поверхні Фермі є корельованими парами в імпульсному просторі. Це призводить до появи щілини в спектрі збудження, який в просторово-однорідному випадку має вигляд (рис. 1). Енергетичний спектр визначається формулою:

$$\varepsilon_k = \sqrt{\left[ \hbar^2 (k^2 - k_F^2) / 2m \right]^2 + \Delta^2}, \quad (1)$$

де  $\varepsilon_k$  і  $k$  – енергія збудження і імпульс,  $k_F = \sqrt{2mT_F/\hbar^2}$  – імпульс Фермі, а  $m$  – маса частинок. Щілина  $\Delta$  залежить від параметрів взаємодії, густина і температури.

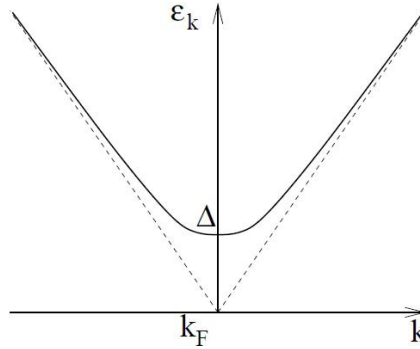


Рис. 1: Спектр збуджень надплинної уніформи фермі-газу

Мікроскопічна теорія надпровідності була сформульована в 1957 році Бардіном, Купером, Шриффером [2], і вона відома сьогодні як теорія БКШ звичайних надпровідників. Автори теорії БКШ були удостоєні Нобелівської премії з фізики в 1972 році, і їх праця була заснована на моделі розрахунку, проведеного Купером в 1956 р. [3], яка спирається на існуванні міжчастинкової взаємодії.

Основною ідеєю Купера було те, що слабке тяжіння може зв'язати пари ферміонів у пов'язані пари в присутності фермі-хвиль, і що фермі-хвиля не стійка проти формування щонайменше одної пов'язаної пари незалежно від того, чи була слабка міжчастинкова взаємодія [3]. Цей найважливіший результат є наслідком статистики Фермі-Дірака і існування поверхні Фермі.

Перехід БКШ в атомних фермі-газах дуже схожий на перехід від нормального провідника до надпровідника у звичайних металах, або на перехід нормальної рідини до надрідини у рідкому  $^3\text{He}$ . Таким чином, можливість вивчення такого переходу в атомних системах залучила інтенсивний теоретичний і експериментальний інтерес у всьому світі [4].

У 1969 році відбулося перше обговорення про БКШ–БАК перехід, в якому наявне скучування парами вище температури надпровідного переходу з низькою густиною носіїв. Блатт зазначив, якщо концентрація носіїв мала, то система знаходиться в режимі, де розміри куперівських пар малі і критичний перехід температури в теорії БКШ не відповідає фазовому переходу, але відповідає формуванню попередньо сформованих пар. Він також стверджував, що перехід в надпровідний стан буде відбуватися на більш низькій температурі в стані низької густини, відповідно БАК сформованих пар. Тоді він запропонував вивчити цю проблему переходу варіюючи концентрацію носіїв [5].

Перехід від БКШ стану до стану Бозе-Айнштайнівської конденсації (БАК) може відбуватися при нульовій температурі, при якій властивості розрідженого газу ферміонів будуть змінюватися постійно між двома граничними поведінками, оскільки змінюється сила взаємодії [6].

В роботі досліджено метод для вимірювання температури за допомогою спінового стану домішок. Дослідивши даний метод було з'ясовано, що він використовується для вимірювання температури найхолодніших газів при  $0.1 T_F$  і нижче, у зв'язку із зменшенням чутливості поверхні Фермі-Діракка [5].

**Список літератури:**

1. Astrakharchik G. E. Momentum Distribution and Condensate Fraction of a Fermion Gas in the BCS-BEC Crossover / G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, S. Giorgini // Phys. Rev. Lett., 2005.- 230405 – 95p.
2. Bardeen J. Theory of Superconductivity / J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer // 1957.- 1175 – 108p.
3. Cooper L. N. Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas / L. N. Cooper // Phys. Rev. Lett., 1956.- 1189 – 104p.
4. Tinkham M. Introduction to superconductivity / M. Tinkham // New York: Dover, 1996.
5. DeMarco B. Quantum behavior of an atomic Fermi gas [Ph.D. thesis] / B. DeMarco // Boulder: University of Colorado, – 2001.
6. Leggett A. J. In modern trends in the theory of condensed matter / A. J. Leggett edited by A. Peralski and R. Przystawa // Berlin: Springer-Verlag, 1980.

## **ЗГАСАННЯ ЗВУКІВ В ПРОСТОРОВО-ОДНОРІДНОМУ КОНДЕНСОВАНОМУ БОЗЕ-ГАЗІ**

**Дмитрук І. П.<sup>1</sup>, Шигорін П. П.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>аспірантка кафедри теоретичної та математичної фізики

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: dmtirp@gmail.com,

<sup>2</sup>кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної та математичної фізики

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: pashyh@gmail.com

Основним інструментом опису нерівноважних процесів у розріджених газах є кінетичні рівняння. У випадку класичних газів — це кінетичне рівняння Больцмана. При описі квантових систем тотожних частинок використовують рівняння Улінга — Уленбека [1], яке є квазікласичним розширенням рівняння Больцмана. Значно складнішим є опис квантових систем із спонтанно порушеною симетрією, до яких відносяться розріджені гази атомів Бозе нижче температури Бозе-Айнштайнівської конденсації. Додаткові труднощі опису таких систем пов'язані із наявністю Бозе-Айнштайнівського конденсату. Відповідна система рівнянь динаміки конденсованого бозе-газу складається із кінетичного рівняння типу Улінга — Уленбека для атомів надкондесату та рівняння Гросса — Пітаєвського, яке описує еволюцію хвильової функції конденсатних атомів.

Робота присвячена теоретичному описові процесу поширення звукових хвиль у розріджених газах атомів Бозе за наявності Бозе-Айнштайнівського конденсату. Оскільки у процесі поширення

звукової хвилі відбуваються незначні відхилення від стану локальної термодинамічної рівноваги, відповідний опис можна проводити на рівні лінеаризованих кінетичних рівнянь.

У роботі побудоване рівняння, яке описує слабо-нерівноважні процеси в розрідженому просторово-однорідному бозе-газі за наявності конденсату. Використовуючи узагальнене рівняння Гросса-Пітаєвського для конденсату та квантове кінетичне рівняння Больцмана для теплової хмарини [2], отримано замкнене лінеаризоване рівняння Больцмана, яке описує надконденсатні ступені вільності на фоні конденсату. За схемою опису поширення звуку Ван Чан та Уленбека [3] досліджено дисперсійне співвідношення між хвильовим числом та частотою звукової хвилі, яке включає згасання, пов'язане із коефіцієнтами переносу, зокрема в'язкістю. У роботі досліджена задача на власні функції та власні значення оператора лінеаризованого інтеграла зіткнень квантового кінетичного рівняння Больцмана для моделі слабо-неідеального однорідного бозе-газу за наявності в ньому бозе-конденсату. Систему власних функцій та значень оператора лінеаризованого інтеграла зіткнень застосовано до теоретичного опису звукових хвиль, розрахунку коефіцієнта в'язкості.

Як і очікувалось, перший і другий звук гібридизуються при низьких температурах. Це вперше було обговорено в роботі Лі і Янга, присвяченій колективним модам в однорідному бозе-газі [4]. За дуже низьких температур, коли швидкості звуків приблизно рівні, змінюється фізичний зміст цих двох мод в результаті гібридизації. Перший звук має скіченну швидкість при прямуванні температури до нуля. Таким чином, в низькотемпературній області перший звук — це коливання густини конденсату. Вище температури гібридизації перший звук відповідає коливанням густини теплової хмарини, другий звук — це в основному коливання густини конденсату.

У роботі наведені чисельні результати для моделі просторово-однорідного бозе-конденсованого газу. У цьому випадку ми показали наявність згасання першого і другого звуків та дослідили вплив в'язкості газу на його величину.

#### *Список літератури:*

1. Uehling E.A. Transport phenomena in Einstein-Bose and Fermi-Dirac gases / E.A. Uehling, G.E. Uhlenbeck // Phys. Rev. — 1933. — Vol. 43. — P. 552-561.
2. Griffin A. Bose condensed gases at finite temperatures / A. Griffin, T. Nikuni, E. Zaremba. — Cambridge University Press. — 2009. — 462 p.
3. Wang Chang C. S. On the propagation of sound in monatomic gases / C. S. Wang Chang, G. E. Uhlenbeck — University of Michigan Press, 1952.
4. Lee T.D. Low-temperature behavior of a dilute bose system of hard spheres II. Nonequilibrium properties / T.D. Lee, C.N. Yang // Phys. Rev. — 1959. — V. 113 — 1406 p.

# ЕНЕРГЕТИЧНИЙ ПЕРЕРОЗПОДІЛ ВАЛЕНТНИХ Ор-, Alsd- ТА Sisd- ЕЛЕКТРОНІВ ВНАСЛІДОК МЕХАНОАКТИВАЦІЇ СУМІШЕЙ $0.2*Al_2O_3+0.8*SiO_2$ .

Ільків В. Я.<sup>1</sup>, Зауличний Я. В.<sup>2</sup>, Яворський Ю. В.<sup>3</sup>, Зарко В. І.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>асистент кафедри «Металознавства та термічної обробки»

Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут», e-mail: born1987@ukr.net,

<sup>2</sup>доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри «Металознавства та термічної обробки»

Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут», e-mail: zaulychnyy@ukr.net,

<sup>3</sup>аспірант кафедри «Металознавства та термічної обробки»

Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут», e-mail: yar-ura@ukr.net,

<sup>4</sup>кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник Інституту хімії поверхні ім. О. О. Чуйка

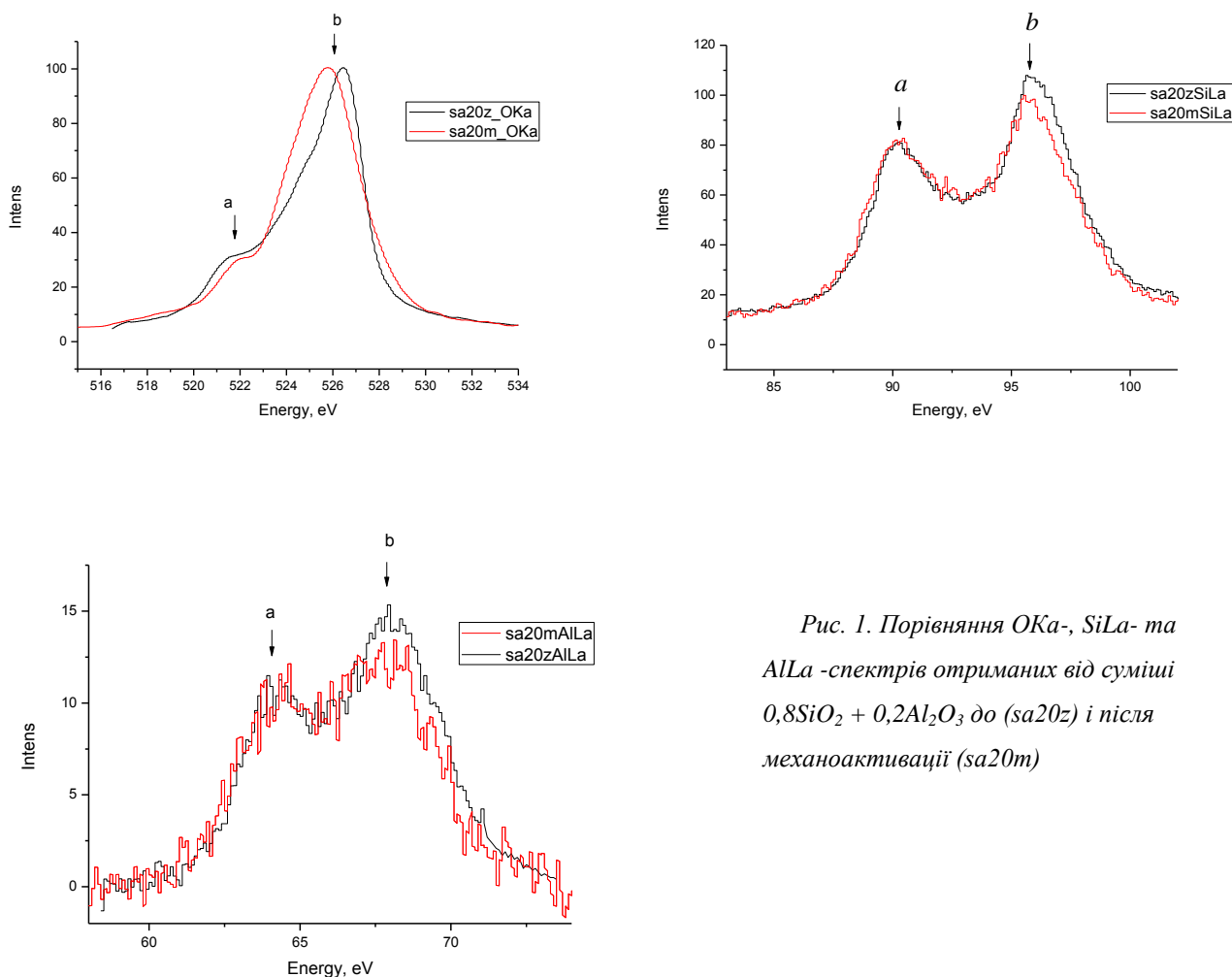
Національної Академії наук України, vzarko@ukr.net

Серед великого спектру нових наноматеріалів [1-5], які знаходять своє застосування в фотокатализі, електрохімії, термоелектриці, особливе місце займають матеріали, в яких, сорбційні, фото каталітичні, фотоелектричні та електрохімічні властивості [6-8] визначаються зарядовим та енергетичним станом іонів, які в свою чергу залежать від енергетичного перерозподілу валентних електронів атомів поверхневих шарів наночастинок, з дуже розвинутою поверхнею. До наноматеріалів, які володіють такими властивостями і є високо стабільними та не токсичними в умовах їх експлуатації, належать  $SiO_2$  та  $Al_2O_3$ .

Одним із широкозастосовуваних методів обробки нанокompозитних матеріалів є механоактивація [8]. Взаємодоповнення індивідуальних властивостей наноматеріалів у композитах і вплив механоактивації на ці властивості є хорошим рушієм для вивчення впливу цього методу на енергетичний розподіл валентних електронів композитів.

Для з'ясування зміни характеру розподілу валентних електронів кисню, розглянемо порівняння отриманих від сумішей  $0,8SiO_2 + 0,2Al_2O_3$  ОКа –смуг до і після механічної обробки (рис. 1). Аналіз цього порівняння, показав, що головний пік «b» ОКа-смуги, котрий відображає розподіл незв'язуючих електронів кисню (електронів перенесених від металу до кисню) різко розширюється на 0,2-0,8 eВ в низько енергетичну область, де зокрема відображаються слабозв'язуючі Орл- стани. Це супроводжується зміщенням в високоенергетичний бік контуру ковалентно-зв'язуючої під смуги на 0,2-0,4eВ та підвищення інтенсивності ОКа –смуги у області яка прилягає до стелі валентної зони, що привело до зміщення в цій області високоенергетичного контуру піку «b» в короткохвильовий бік на 0,4eВ. Це може бути наслідком дегібридизації ковалентно зв'язуючих Alsd+Or-ковалентно зв'язуючих станів і участі електронів, які їх заселяли в слабозв'язуючих Орл- зв'язках та заселення Ор-рівнів поблизу стелі валентної зони. Крім цього за

рахунок такого перерозподілу Ор-електронів, пік «b» OKa- смуги отриманої від механообробленої суміші змістився на 0,7eV в низькоенергетичну область.



*Рис. 1. Порівняння OKa-, SiLa- та AlLa- спектрів отриманих від суміші  $0,8\text{SiO}_2 + 0,2\text{Al}_2\text{O}_3$  до (sa20z) і після механоактивації (sa20m)*

Так, як найбільша залежність відмінностей проявляється в високоенергетичній вітці піку «b», який відображає розподіл Ор-електронів поблизу стелі валентної зони, то варто розглянути порівняння SiLa- та AlLa- смуг емісії (які відображають розподіли sd-електронів), до і після механохімічної обробки цих сумішей. Із суміщення SiLa – смуг емісії видно, що після механохімічної обробки максимум «a», що відображає розподіл низькоенергетичних Sis-електронів дещо зміщується на 0,3eV при цьому розширюючись в короткохвильовий бік на 0,3 eV завдяки більшому зміщенню в сторону високих енергій (на 0,5eV) його низько енергетичного контуру. В той же час відносна інтенсивність піку «b»  $I_b/I_a$  зменшується при переході від необробленої до обробленої від 1,40 до  $1,25 \pm 0,03$ . Це може бути зв'язано із зменшенням вкладу поблизу стелі валентної зони електронів d-симетрії, які відображаються цим піком. Що є наслідком переходу електронів із d-станів кремнію, у високоенергетичні Ор-стани, оскільки інтенсивність OKa-смуги емісії отриманої після механо-хімічної обробки суміші зростає поблизу стелі валентної смуги. Такий ж ефект спостерігається при аналізі AlLa-смуг. Таким чином можна



стверджувати, що в наслідок механоактивації електрони, які заселяли високоенергетичні стани кремнію та алюмінію переходять до іонів кисню, заселяючи Ор<sub>p</sub>- та незв'язуючі Ор- стани кисню.

**Список літератури:**

- 1.T. Ding, K. Song, K. Clays, C.H. Tung, Adv. Mater. 21 (2009) 1936–1940.
- 2.X.X. Yu, S.W. Liu, J.G. Yu, Appl. Catal., B 104 (2011) 12–20.
- 3.V. Rinnerbauer, S. Ndao, Y.X. Yeng, W.R. Chan, J.J. Senkevich, J.D. Joannopoulos, M. Soljačić, I. Celanovic, Energy Environ. Sci. 5 (2012) 8815–8823.
- 4.Я. В. Зауличний, О. О. Фоя, В. Л. Бекенцов/ Дослідження особливостей електронної структури нанопорошків BaTiO<sub>3</sub> // Фізика і хімія твердого тіла. - 2009. - 10, № 3. - С. 559-564.
5. J.L. Gole, J.D. Stout, C. Burda, Y. Lou, X. Chen. J. Phys.Chem. B **108**, 1230 (2004).
- 6.Ya.V. Zaulychny, Yu.M. Solonin, O.O. Foya, O.Yu. Khyzhun, O. Vasykiv. Energy Redistribution of the Valence Electrons Due to Nanodispersion of Materials and Its Evidence as Determined by the Ultrasoft X-Ray Emission Spectra // Metallofiz. Noveishie Teknol., 30(2), pp. 169-187 (2008).
- 7.Hua Yang, Wenbo Mi, Haili Baia and Yingchun Cheng / Electronic and optical properties of new multifunctional materials via halfsubstituted hematite: first principles calculations // RSC Advances, 2012, 2, 10708–10716p.
- 8.V.M. Gun'ko, V.Ya. Ilkiv, Ya.V. Zaulychnyy ,V.I.Zarko ,E.M.Pakhlov, M.V. Karpetz. Structural features of fumed silica and alumina alone, blend powders and fumed binary systems\\ Journal of Non-Crystalline Solids 403 (2014) 30–37p.

УДК 538.9

## **ЗМІНА ЕНЕРГЕТИЧНОГО РОЗПОДІЛУ ВАЛЕНТНИХ ЕЛЕКТРОНІВ СУМІШЕЙ $x\text{-SiO}_2+y\text{-}\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ДО І ПІСЛЯ МЕХАНОАКТИВАЦІЇ**

**Яворський Ю. В.<sup>1</sup>, Зауличний Я. В.<sup>2</sup>, Ільків В. Я.<sup>3</sup>, Зарко В. І.<sup>4</sup>, Міщенко. В. М.<sup>5</sup>**

<sup>1</sup>аспірант кафедри «Металознавства та термічної обробки»

Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут», e-mail: yar-ura@ukr.net,

<sup>2</sup>доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри «Металознавства та термічної обробки»

Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут», e-mail: zaulychnyu@ukr.net,

<sup>3</sup>асистент кафедри «Металознавства та термічної обробки»

Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут», e-mail: born1987@ukr.net,

<sup>4</sup>кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник Інституту хімії поверхні ім. О. О. Чуйка

Національної Академії наук України, e-mail: vzarko@ukr.net,

<sup>5</sup>кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник відділу наноматеріалів

Інституту хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної Академії наук України, e-mail: lutsbass@ukr.net

Серед великого спектру нових наноматеріалів [1-6], які знаходять своє застосування в фотокаталізі, електрохімії, термоелектриці, особливе місце займають матеріали, в яких, сорбційні, фото каталітичні, фотоелектричні та електрохімічні властивості [7-9] визначаються зарядовим та енергетичним станом іонів, які в свою чергу залежать від енергетичного

перерозподілу валентних електронів атомів поверхневих шарів наночастинок, з дуже розвинутою поверхнею. До наноматеріалів, які володіють такими властивостями і є високо стабільними та не токсичними в умовах їх експлуатації, належать  $\text{SiO}_2$  та  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ .

Одним із широкозастосовуваних методів обробки нанокомпозитних матеріалів є механоактивація [9]. Взаємодоповнення індивідуальних властивостей наноматеріалів у композитах і вплив механоактивації на ці властивості є хорошим рушієм для вивчення впливу цього методу на енергетичний розподіл валентних електронів композитів із різним масовим співвідношенням компонент. Кристалічний  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  з питомою поверхнею  $7 \text{ м}^2/\text{г}$  та областю когерентного розсіювання  $92 \text{ нм}$  був синтезований методом термічного розкладу гідратованого оксалату заліза, а аморфний  $\text{SiO}_2$  з питомою поверхнею  $300 \text{ м}^2/\text{г}$  та середнім розміром частинок на питому поверхню  $9 \text{ нм}$ . Синтез сумішей  $x\text{-SiO}_2 + y\text{-Fe}_2\text{O}_3$  (20/80, 50/50, 80/20) проводився шляхом звичайного перемішування, а синтез механоактивованих сумішей виконувався у механічному вібраторі Adrenne з частотою  $50 \text{ Гц}$ . Час синтезу усіх систем становив  $5 \text{ хв}$ .

При аналізі результатів рентгенофазового аналізу простих та механоактивованих сумішей було видно, що фазовий склад сумішей в результаті механоактивації не міняється і залишається в межах похибки експерименту. Проте зі збільшенням вмісту оксиду кремнію 20/80, 50/50, 80/20 у механоактивованих сумішах приводить до зменшення області когерентного розсіювання на  $8, 15, 22 \text{ нм}$ .

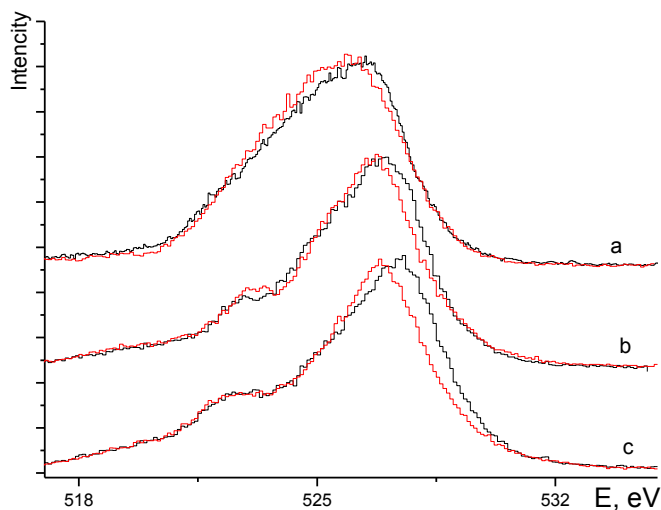


Рис. 1.  $\text{O}1s$ -смуга до і після механоактивації, а –  $0,2 \text{ SiO}_2 + 0,8 \text{ Fe}_2\text{O}_3$ , б –  $0,5 \text{ SiO}_2 + 0,5 \text{ Fe}_2\text{O}_3$ , с –  $0,8 \text{ SiO}_2 + 0,2 \text{ Fe}_2\text{O}_3$ , червона лінія  $\text{O}1s$ -смуга суміші, чорна  $\text{O}1s$ -смуга механоактивованої суміші.

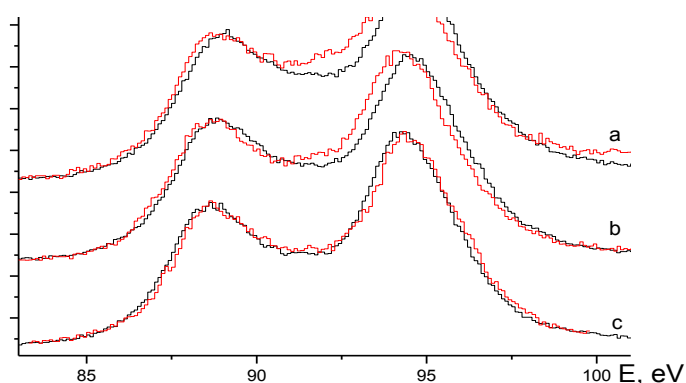


Рис. 2.  $\text{Si}2p$ -смуги до і після механоактивації, а –  $0,2 \text{ SiO}_2 + 0,8 \text{ Fe}_2\text{O}_3$ , б –  $0,5 \text{ SiO}_2 + 0,5 \text{ Fe}_2\text{O}_3$ , с –  $0,8 \text{ SiO}_2 + 0,2 \text{ Fe}_2\text{O}_3$ , червона лінія  $\text{Si}2p$ -смуга суміші, чорна  $\text{Si}2p$ -смуга механоактивованої суміші.

При аналізі ультрам'яких рент-генівських спектрів ОК $\alpha$ -смуг сумішей  $x\text{-SiO}_2 + y\text{-Fe}_2\text{O}_3$  з різним масовим співвідношенням компонент, при зменшенні вмісту  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ , спостерігався поступовий перехід від широкої ОК $\alpha$ -лінії, яка притаманна оксиду заліза, до вузької лінії з додатковим піком в області низьких енергій, яка притаманна діоксиду кремнію. У механоактивованих нанокompозитах із таким самим співвідношенням компонент спостерігається те ж саме поступове переміщення довгохвильового контуру в сторону високих енергій, проте короткохвильовий контур зміщується у сторону високих енергій дещо більше (Рис. 1). Це можна пояснити тим, що відбувається дегібридизація Ор-станів із збільшенням заселеності їх у високоснергетичній області. При цьому спостерігається цікава залежність зниження заселеності SiL $\alpha$ -смуги (Рисю 2) в області енергій  $h\nu = (90,6 \div 94,6)\text{eV}$ . Зниження інтенсивності зменшується при збільшенні вмісту діоксиду кремнію у суміші. Це свідчить про те, що при високих локальних тисках та температурах при механоактивації відбувається дегібридизація електронних станів у валентній зоні та можливе перекриття Ор-, Fe3d-, та Sisd-станів, при цьому можливе заселення гібридизованих Fe3d + Ор-станів. Внаслідок механохімічної активації сумішей  $x\text{-SiO}_2 + y\text{-Fe}_2\text{O}_3$  спостерігається перенос електронів від катіонів кремнію до аніонів кисню які належать як  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  так і  $\text{SiO}_2$ .

#### *Список літератури:*

- 1.T. Ding, K. Song, K. Clays, C.H. Tung, Adv. Mater. 21 (2009) 1936–1940.
2. X.X. Yu, S.W. Liu, J.G. Yu, Appl. Catal., B 104 (2011) 12–20.
- 3.V. Rinnerbauer, S. Ndao, Y.X. Yeng, W.R. Chan, J.J. Senkevich, J.D. Joannopoulos, M. Soljačić, I. Celanovic, Energy Environ. Sci. 5 (2012) 8815–8823.
- 4.Я. В. Зауличний, О. О. Фоя, В. Л. Бекеньов/ Дослідження особливостей електронної структури нанопорошків BaTiO<sub>3</sub> // Фізика і хімія твердого тіла. - 2009. - 10, № 3. - С. 559-564.
- 5.Pieremanuele Canepa, Eleanor Schofield, Alan V. Chadwick and Maria Alfredsson. Comparison of a calculated and measured XANES spectrum of  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ // Phys. Chem. Chem. Phys., 13, 12826–12834, 2011.
6. J.L. Gole, J.D. Stout, C. Burda, Y. Lou, X. Chen. J. Phys.Chem. B **108**, 1230 (2004).
- 7.Ya.V. Zaulychny, Yu.M. Solonin, O.O. Foya, O.Yu. Khyzhun, O. Vasylykiv. Energy Redistribution of the Valence Electrons Due to Nanodispersion of Materials and Its Evidence as Determined by the Ultrasoft X-Ray Emission Spectra // Metallofiz. Noveishie Teknol., 30(2), pp. 169-187 (2008).
- 8.Hua Yang, Wenbo Mi, Haili Baia and Yingchun Cheng / Electronic and optical properties of new multifunctional materials via halfsubstituted hematite: first principles calculations // RSC Advances, 2012, 2, 10708–10716p.
- 9.V.M. Gun'ko, V.Ya. Ilkiv, Ya.V. Zaulychnyy, V.I.Zarko, E.M.Pakhlov, M.V. Karpetz. Structural features of fumed silica and alumina alone, blend powders and fumed binary systems // Journal of Non-Crystalline Solids 403 (2014) 30–37p.

# НАУКОВІ ПРИНЦИПИ СТВОРЕННЯ НОВИХ АНАЛІТИЧНИХ СИСТЕМ

## SCIENTIFIC PRINCIPLES OF NEW ANALYTICAL SYSTEMS DEVELOPMENT

UDC Identifier 544

### CONFORMATIONAL ISOMERS OF 4-CHLORO-1-NAPHTHOL AND 4- METHOXY-1-NAPHTHOL - THEORETICAL ANALYSIS

**Ilona Radkowska**

Student of Chemistry, Mathematical and Natural Science Faculty,  
Jan Dlugosz University in Czestochowa, Poland, e-mail: radkowska.ilona@gmail.com

1-naphthols form an important group of organic molecules. It is a result of their numerous applications, including organic synthesis and pharmaceuticals [1-6]. A lot of them are of very low symmetry, belongs to the C1 point group, there is a chance to find a suitable material for use in organic electronics. Hence there is a need to test as many representatives of this group as it is possible. There have not been published any theoretical studies on 4-chloro-1-naphthol and 4-methoxy-1-naphthol, although their crystal structures had been found [7, 8] and there are \*.cif files available for them. This work is a beginning of computational analysis of these two compounds.

Presence of a substituent, which is the hydroxyl group and/or the methoxy group, in the naphthalene aromatic ring allows molecule to exist in several conformational alterations. The aim of this study is to find these isomers and determine energy changes associated with changing orientation of the substituent.

All calculations were made in Gaussian 09 ver. D1 program. The starting point was geometry generated from \*.cif file. It was optimized using four different methods (HF, MP2, DFT with the B3LYP hybrid potential and the SVWN local potential) and two basis sets (6-31G(d) and 6-311+G(3d,2p)). Calculations were performed to find stationary points and transition states on the potential energy surfaces, using DFT method with B3LYP hybrid functional in 6-311+G(3d,2p) basis set. 4-methoxy-1-naphthol energies at positions changes of two substituent groups were calculated in 576 points, each geometry was fully optimized.

Structural parameters of free molecules obtained by MP2 and B3LYP methods are in better match to experimental values (measured in the solid phase [7, 8] – crystallographic data from \*.cif file) than these

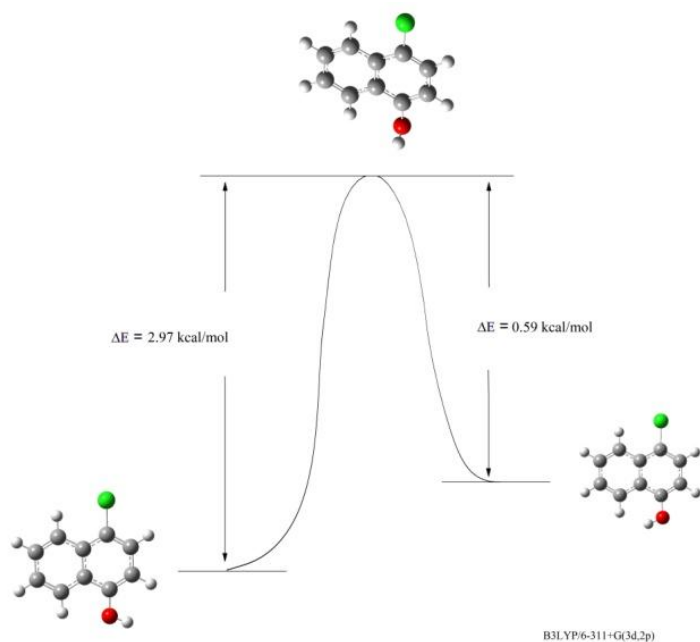


Figure 1. The activation barriers between individual stationary points on PES for 4-chloro-1-naphthol; B3LYP/6-311+G(3d,2p).

More stable conformation is the trans isomer, in which the hydroxyl group is directed outside of the molecule, in less stable isomer (cis) OH group is oriented in direction of the second benzene ring. These results correspond to calculations carried out for the unsubstituted 1-naphthol

from the other type of calculations. Results show, as it often happen, that the larger basis set not always improves results of geometry optimization. After comparison of results of different methods, the quality image of molecules is similar. Differences in lengths of C-C, C-O bonds, do not exceed 0.03 Å and angles do not exceed 1 degree.

A section through the potential energy surface (PES) of 4-chloro-1-naphthol showed that the compound has two isomers related to changing orientation of the hydroxyl group. In both cases, the hydroxyl group lies in the plane of the ring (as in a case of the 1-naphthol [9]). Energy difference between them is only 1.23 kcal/mole (kT value at 298

K is 0.59 kcal/mole). Energy difference between the trans-1-naphthol and the cis-1-naphthol is 1.19 kcal/mole [9]. In the transition state (TS) of 4-chloro-1-naphthol the hydroxyl group is oriented almost perpendicular to the plane of the naphthalene ring. The substituent position change influence in relation to geometry of the molecule remainder is negligible - maximum deviation from the rings planarity is less than 2 degrees.

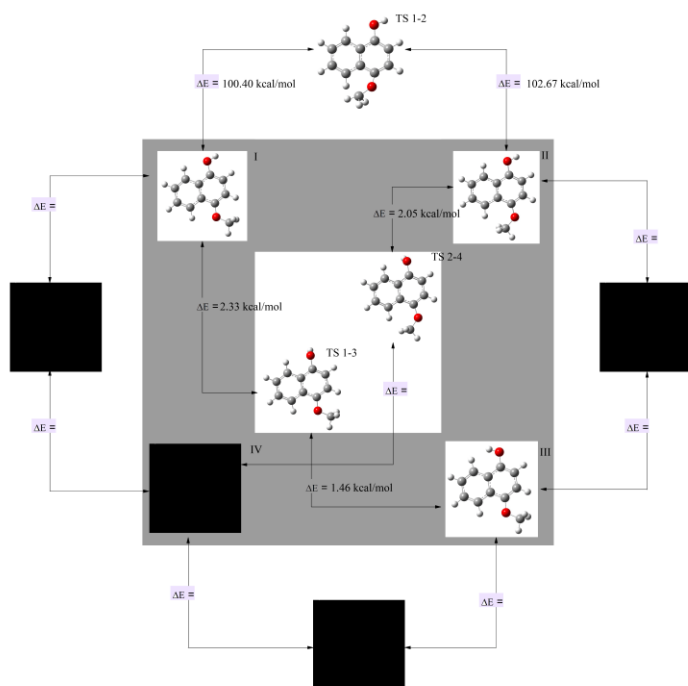


Figure 2. The activation barriers between individual stationary points on PES for 4-methoxy-1-naphthol; B3LYP/6-311+G(3d,2p).

The scan of potential energy for 4-methoxy-1-naphthol indicates that change in position of the methoxy group requires a considerable energy - activation energy to the transition state is more than 100 kcal/mole. Much more energetically favorable is conformation, in which the methoxy group is facing the second

benzene ring. It should be noted that oxygen atom and carbon atom of this group lie in the plane of the naphthalene ring. Changing position of the hydroxyl group (located in the plane of the ring) does not have such a significant impact on energy of the molecule - required energy is approximately 2 kcal/mole. Thus, for this compound there are four possible isomers. At the B3LYP/6-311+G(3d,2p) level there were obtained six optimized structures (three isomers and three transition states). They are given on a figure 2. The dark places marked on it correspond to structures, which geometries optimizations were failed with this method. From all isomers, the most energetically preferred is isomer with both groups facing outwards of the ring (designated as I on Figure 1.). Next is III (the hydroxyl group is facing to the second benzene ring), then II (the methoxy group is directed to the second benzene ring, the hydroxyl group to the outside). It can be expected that the least stable is the IV isomer, due to repulsion of charges accumulated on the naphthalene ring atoms and substituent groups atoms lying near this ring.

The analysis of PES obtained with DFT method with B3LYP hybrid functional showed that 4-chloro-1-naphthol and 4-methoxy-1-naphthol exist as conformational isomers. 4-chloro-1-naphthol has two isomers differing in the hydroxyl group orientation. Of these, the trans isomer is more stable. 4-methoxy-1-naphthol has four conformational isomers mutually differing in orientation of the hydroxy and methoxy groups, three of them have been obtained so far. The most energetically preferred is the conformer with both groups facing outwards of the molecule.

#### References:

- 1.X. Huang, G. Zhao, M. Liu, F. Li, J. Qiao oraz S. Zhao, 'Highly sensitive electrochemical determination of 1-naphthol based on high-index facet SnO<sub>2</sub> modified electrode', *Electrochimica Acta* (2012), 83, 478– 484.
2. Z. Lou, S. Zhang, C. Chen, X. Pang, M. Li, L. Wen, 'Concise Synthesis of 1-Naphthols under Mild Conditions through a Copper-Catalyzed Arylation of Methyl Ketones', *Adv. Synth. Catal.* (2014), 356, 153–159.
- 3.V. Mabuatsela, J. H. Maphoru, K. P. Sreejarani, 'Oxidative Coupling of 1-Naphthols over Noble and Base Metal Catalysts', *ChemPlusChem* (2014), 79, 99 – 106.
- 4.M. El-Agrody Ahmed, M. F. Ahmed, A. E. H. K. Essam Shawky, 'Synthesis, antitumor activity of 2-amino-4H-benzo[h]chromene derivatives, and structure–activity relationships of the 3- and 4-positions', *Med Chem Res* (2013), 22:6105–6120.
5. U. Ruktanonchai, O. Nuchuchua, R. Charlermroj, T. Pattarakankul oraz N. Karoonuthaisiri, , 'Signal amplification of microarray-based immunoassay by optimization of nanoliposome formulations', *Anal. Biochem.* (2012), 429, 142–147.
- 6.A. G. Al-Sehemi, A. Irfan oraz A. M. El-Agrody, 'Synthesis, characterization and DFT study of 4H-benzo[h]chromene derivatives', *Journal of Molecular Structure* (2012), 1018, 171–175.
- 7.B. Marciniak, E. Rozycka-Sokolowska, '4-Methoxy-1-naphthol: chains formed by O–H···O hydrogen bonds and  $\pi$ –  $\pi$  stacking interactions', *Acta Cryst.* (2009), C65, o630–o634.
- 8.E. Rozycka-Sokolowska, B. Marciniak, '4-Chloro-1-naphthol', *Acta Cryst.* (2005), C65, o207–o210.
9. M. Muzomwe, B. Boeckx, G. Maes oraz O. E. Kasende, 'Matrix isolation FT-IR and theoretical DFT/B3LYP spectrum of 1-Naphthol', *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* (2013), 108, 14–19.

# ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНИЙ СЕНСОР ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ САХАРИНУ

Бережна І. С.<sup>1</sup>, Савчук Т. І., Мазуренко І. В., Корольчук С. І.,  
Супрунович С. В., Кормош Ж. О.

<sup>1</sup>студентка хімічного факультету Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,  
e-mail: karolina\_berezna@mail.ru

Останнім часом зріс інтерес до такої групи речовин, як підсолоджувачі або замітники цукру. Виникає багато суперечок на рахунок користі чи шкоди даних речовин. Загроза для здоров'я та широке використання їх призвело до створення багатьох методів визначення підсолоджувачів в продуктах харчування. Проте вони не завжди є раціональними і доцільними для всіх речовин даної групи. Тому, актуальним є розробка, дослідження і вдосконалення нових точних та експресних методів визначення підсолоджувачів. Одним із представників підсолоджувачів є сахарин. Метою роботи було розроблення нових методів точного та експресного визначення концентрації сахарину потенціометричним методом. Основне завдання: визначити оптимальний склад сахарин-чутливих мембран.

Сахарин (імід орто-сульфобензойної кислоти, імід 2-сульфобензойної кислоти, орто-сульфобензімід) – безбарвні кристали солодкого смаку, Т.пл. 228-229 °С, 1 г розчиняється в 290 мл холодної або 25 мл гарячої води, густина 0,828 г/см<sup>3</sup>, харчова добавка Е954 [1].

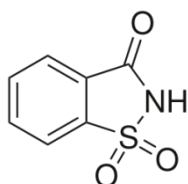


Рис.1. Структурна формула сахарину

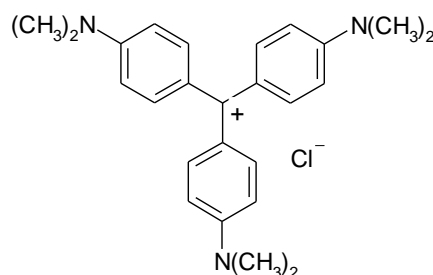


Рис.2. Структурна формула кристалічного фіолетового

Встановлено, що сахарин здатний утворювати іонний асоціат (ІА) з основним барвником кристалічним фіолетовим (КФ), який можна використати як електродоактивну речовину (ЕАР) при виготовленні мембранного сенсора для визначення сахарину.

Експериментально встановлено, що на властивості сенсора впливає природа пластифікатора, кількість ЕАР та пластифікатора. Після тривалих досліджень було встановлено оптимальний склад полівінілхлоридних (ПВХ) сахарин-чутливих мембран на основі ІА сахарину із кристалічним фіолетовим: 10 % ЕАР, 65 % трикрезилфосфату (ТКФ), 34 % ПВХ, фон – 0,1 М NaCl, розчинник – тетрагідрофуран (ТГФ). Крутизна електродної функції для даної мембрани становить 72 мВ/рС, лінійність електродної функції в межах  $1 \cdot 10^{-1}$  –  $1 \cdot 10^{-3}$  моль/л, нижня межа визначення становить

$2,75 \cdot 10^{-3}$  моль/л. Електроди працюють у досить широких межах кислотності середовища – потенціал мембран є більш стабільним в інтервалі рН 3 – 11. Отримали результати селективності розробленого сенсору по відношенню до деяких неорганічних та органічних іонів. Виявлено, що такі іони як  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{PO}_4^{3-}$ ,  $\text{SCN}^-$ ,  $\text{C}_6\text{H}_5\text{COO}^-$  (бензоат),  $\text{C}_6\text{H}_4\text{OHCOO}^-$  (саліцилат) та  $\text{C}_3\text{H}_4\text{OH}(\text{COO}^-)_3$  (цитрат) не впливають на визначення сахарину.

За допомогою розробленого сенсору було визначено вміст сахарину в двох зразках солодких вод. Результати представлено в таблиці 1.

Таблиця 1. Концентрація сахарину в досліджуваних солодких водах

Номер зразка	Назва продукту	Виробник	Знайдений вміст сахарину
1	«Фрутс. Лимонад»	ТОВ «Аквапласт» м.Дніпропетровськ Україна	$2,29 \cdot 10^{-3}$ моль/л
2	«Чудо-сад. Байкал»	ТОВ-Підприємство «Ізумруд ЛТД» м.Кременчук Україна.	$2,14 \cdot 10^{-2}$ моль/л

**Список літератури:**

1. Крутошинова А. Природные и синтетические сладкие вещества / А. Крутошникова, М. Угер; пер. с словац. С.С. Злотский. – М.: Мир, 1988. – 120 с.

## ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНИЙ СЕНСОР ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ТІОЦІАНАТ-ІОНІВ

**Бережна І. С.<sup>1</sup>, Савчук Т. І., Мазуренко І. В.,  
Корольчук С. І., Супрунович С. В., Кормош Ж. О.**

хімічний факультет Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

e-mail: <sup>1</sup>Iryna1993iryna@ukr.net

Тіоціанат-іон, як правило, присутній в низькій концентрації в сироватці, слині та сечі в результаті перетравлення деяких овочів, що містять глюкозинолати (капуста, ріпа) або прийомом продуктів, які містять тіоціанати, таких як молоко і сир. Більш високі концентрації цього іона, який є продуктом метаболічної трансформації ціаніду, виникають від тютюнового диму. У цьому відношенні, рівень вмісту тіоціанату – хороший показник для розрізнення курців від некурящих. Деякі тіоціанати використовуються в різних галузях промисловості та виробництва. Таким чином,



розробка точного, простого і швидкого способу для визначення тiocіанату в різних сферах науки і медицині є дуже актуальним питанням на сьогодні.

Встановлено, що тiocіанат-іон здатен утворювати ІА з барвником кристалічним фіолетовим (КФ), який можна використати як електродоактивну речовину (ЕАР) при виготовленні мембранного сенсору для визначення  $\text{SCN}^-$  - іонів.

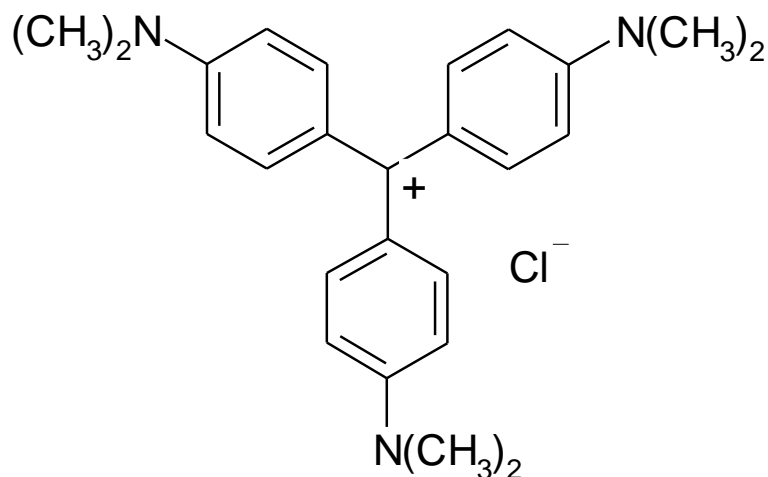


Рис.1. Структурна формула кристалічного фіолетового

Розроблений потенціометричний сенсор для прямого потенціометричного визначення тiocіанату у водних розчинах. Мембрана сенсора виготовлена із полімерної матриці на основі полівінілхлориду, яка містить іонний асоціат і розчинник у вигляді пластифікатора.

В процесі аналізу визначено залежність від природи пластифікатора (диетилфталату, диоктилфталату, дибутилфталату, дибутилсебацінату, трикрезилфосфату); вмісту іонного асоціату та вмісту пластифікатора мембранних ІСЕ.

Запропоновано оптимальний склад мембрани для електродів на основі розчинника тетрагідрофурану; виміряні їх основні електро-аналітичні параметри. Крутизна електродної функції виконується в межах 50-64 мВ/рС; лінійність електродної функції для різних мембран - в межах  $1 \cdot 10^{-4}$  –  $1 \cdot 10^{-1}$  М, нижня межа визначення становить  $n \cdot 10^{-5}$  моль/л. Кращі характеристики показали мембрани, пластифіковані трикрезилфосфатом (ТКФ) та диетилфталатом (ДЕФ). Вплив рН на потенціал електрода було визначено вимірюванням ЕРС при концентрації  $1 \cdot 10^{-2}$  та  $1 \cdot 10^{-3}$  М  $\text{SCN}^-$ . Електрод можна безпечно використовувати в діапазоні рН від 4 до 9,5.

# МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ПОЛІГЕКСАМЕТИЛГУАНІДІНІЮ

Величко Т. С.<sup>1</sup>, Савчук Т. І., Мазуренко І. В.,  
Корольчук С. І., Кормош Ж. О.

<sup>1</sup>студентка хімічного факультету Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,  
e-mail: tetyanochka@mail.ru

В останні роки значно зріс інтерес до класу гуанідинових сполук, особливо полімерних гуанідинів. Основною властивістю яких є знезараження води, продуктів харчування, оскільки, не всі дезінфікуючі речовини задовольняють вимоги, які перед ними поставлені. Одним із таких полімерних гуанідинів, який використовується – полігексаметилгуанідиній. Широке використання полігексаметилгуанідинію призвело до створення багатьох методів визначення вмісту цього полімеру. Відомі методи визначення полігексаметилгуанідинію є не завжди раціональними, і одного методу який можна застосувати для всіх об'єктів немає.

Полігексаметилгуанідин (ПГМГ, polyhexamethyleneguanidine) лінійний, замкнений або розгалужений полімер. Прозора склоподібна маса, температура розм'якшення 100-150°C, розчини його безбарвні, не горючий, не вибухонебезпечний [1].

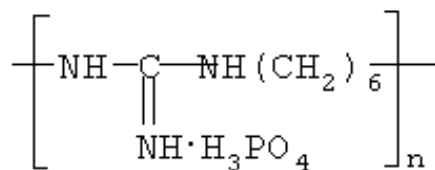


Рис.1. Структурна формула полігексаметилгуанідинію фосфату

В процесі експерименту було дослідження взаємодію ПГМГ з барвником Еозин Н, що призводить до утворення забарвленого іонного асоціату. Для кількісного визначення якого використовували фотометрію. Вимірювали оптичну густина серії розчинів з концентрацією ПГМГ 0,5-10 мг/л у присутності гліцинового буферу (рН=3,5) зі світлофільтром, довжина хвилі якого = 540 нм, на фоні «нульового» розчину, з отриманих даних будували графік  $A = f(C)$  який є лінійним, тобто дотримується основний закон світлопоглинання. Експеримент було проведено з полімерами з двома молярними масами ~3000 і ~5000.

Також було досліджено вплив поверхнево-активних речовин на дану пряmolінійну залежність. В якості ПАР використовували Тритон Х 100. Вимірювання оптичної густини проводили як і в попередньому випадку при додаванні 0,5мл 0,001% Тритон Х 100, з отриманих результатів видно, що Тритон Х100 покращує лінійну залежність оптичної густини від концентрації іонного асоціату ПГМГ. Експериментально було встановлено що закон Бугера – Ламберта – Бера для ПГМГ виконується при використанні 0,001% розчину Тритон Х100 до 0,9 мл.

За допомогою даної методики було визначено вміст ПГМГ у препараті «Дезавід». Результати представлені у таблиці 1 та 2.

Таблиця 1. Результати визначення ПГМГ~3000 спектрофотометричним методом у присутності Тритон X 100 у «Дезавід» ( $n = 9$ ;  $P = 0,95$ )

№ проби	Істина конц., $\mu$	Результат аналізу	Відносна похибка $\epsilon$ , %
Проба 1	3	3,04 $\pm$ 0,08	1,33
Проба 2	5	5,06 $\pm$ 0,11	1,2
Проба 3	6	6,06 $\pm$ 0,12	1,06
Проба 4	7	7,07 $\pm$ 0,17	1,05

Таблиця 2. Результати визначення ПГМГ~5000 спектрофотометричним методом у присутності Тритон X 100 у «Дезавід» ( $n = 9$ ;  $P = 0,95$ )

№ проби	Істина конц., $\mu$	Результат аналізу	Відносна похибка $\epsilon$ , %
Проба 1	3	2,92 $\pm$ 0,11	2,48
Проба 2	5	4,96 $\pm$ 0,07	0,84
Проба 3	6	5,95 $\pm$ 0,08	0,81
Проба 4	7	6,96 $\pm$ 0,07	0,6

Отже, із використанням запропонованої методики можна визначити в середньому 98% від введеної кількості ПГМГ.

#### Список літератури:

1. Полигексаметиленгуанидин: [Електронний ресурс] // Химик: [сайт]. – Режим доступу:  
<http://www.xumuk.ru/encyklopedia/2/3488.html>.

## ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНІ СЕНСОРИ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ КОРДІАМІНУ

Климчук В. С.<sup>1</sup>, Савчук Т. І., Мазуренко І. В., Корольчук С. І., Супрунович С. В.,  
Кормош Ж. О.

<sup>1</sup>студентка хімічного факультету Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,  
e-mail: viktoriiia\_klimchuk@mail.ru

Кордіамін знаходить широке застосування у фармації як аналептичний препарат, який відновлює функції ЦНС, що знаходяться у стані різкого пригнічення. Регулярний попередній

контроль фармацевтичних препаратів, які потрапляють у мережі аптек, а також контроль лікарських засобів на кожному етапі їх транспортування, зберігання та використання є важливою задачею як фармацевтичної, так і аналітичної хімії зокрема.

Тому нашою метою було обґрунтувати можливість аналітичного застосування іонних асоціатів (ІА) кордіаміну з протиіонами, а також розробити й спробувати нові чутливі та селективні потенціометричні методики визначення цього препарату.

Кордіамін – ( $C_{10}H_{14}N_2O$ ) має молекулярну масу 178,23 г/моль. Це масляниста рідина або кристалічна маса, безбарвна або злегка жовтувата, змішується з водою, спиртом, ефіром і хлороформом [1]. Густина кордіаміну становить 1,06 г/см<sup>3</sup>, температура плавлення – 23°C, температура кипіння – 296 – 300°C. Показник заломлення для кордіаміну дорівнює 1,524 [2].

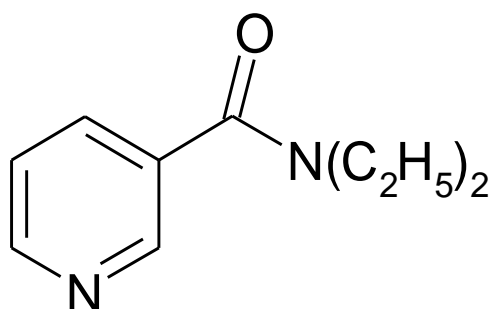


Рис. 1. Структурна формула нікетаміду

Розроблені потенціометричні мембранні сенсори, які базуються на використанні іонних асоціатів (ІА) кордіаміну з основним барвником тетрафенілборатом натрію у якості електродоактивної речовини (ЕАР). При виготовлення мембрани застосовували полівінілхлорид та пластифікатори: дибутилфталат (ДБФ), диетилфталат (ДЕФ), диоктилфталат (ДОФ), дибутилсебацінат (ДБС), трикрезилфосфат (ТКФ) згідно із рекомендаціями Муді [3]. Розчинником слугував тетрагідрофуран. В процесі аналізу визначено залежність від природи пластифікатора, вмісту іонного асоціату та вмісту пластифікатора мембранних ІСЕ.

У результаті досліджень було встановлено, що найкращі електрохімічні характеристики серед розроблених кордіамін-селективних сенсорів показав електрод пластифікований ДОФ із кількісним вмістом в мембрані 65% та ДБФ із кількісним вмістом в мембрані 75% від загальної маси. Оптимальна кількість ІА становить 7%. Розроблені сенсори показують Нернстівську функцію з крутизною 22 – 30 mV/p, межі визначення кордіаміну становлять  $1,0 \cdot 10^{-1}$  –  $1,0 \cdot 10^{-4}$  М. Електрод можна безпечно використовувати в діапазоні рН від 2,3 до 5,0.

Встановлено, що для обох типів сенсорів зміна концентрації внутрішнього розчину порівняння не впливає на їх основні характеристики.

Також розроблені сенсори дозволяють проводити безпомилкове визначення кордіаміну у присутності багатьох неорганічних іонів ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^+$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Ba}^{2+}$ ) та іонів органічної природи.

**Список літератури:**

1. Рубцов М.В. Синтетические химико-фармацевтические препараты / Рубцов М.В., Байчиков А.Г. – М., 1971. – ст. 180 – 181.
2. <http://ru.wikipedia.org/wiki/Никетамид>
3. Moody G. C. A calcium-sensitive electrode based on a liquids ion exchanger in a poly(vinyl-chloride) matrix / G. C. Moody, R. B. Oke, I. D. R. Thomas // Analyst. – 1970. – Vol. 95. – P. 910 – 914.

## **МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ВІТАМІНІВ ГРУПИ В**

**Мудрик Г. М.<sup>1</sup>, Савчук Т. І., Мазуренко І. В., Корольчук С. І., Супрунович С. В.,  
Кормош Ж. О.**

хімічний факультет Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,  
e-mail: <sup>1</sup>annamudryk1993@bk.ru

Для підтримки життєдіяльності організму крім води, мінеральних речовин, білків, жирів, і вуглеводів необхідні вітаміни. Вітаміни групи В є найважливішими представниками біологічно активних речовин, оскільки забезпечують нормальне функціонування організму людини, приймаючи участь у роботі центральної нервової системи, синтезі білка і надходять із зовнішнього середовища разом з продуктами рослинного і тваринного походження.

Враховуючи велику кількість вітамінних, мультивітамінних та інших медичних препаратів на основі вітамінів групи В, їх виробництво, контроль якості, широке використання в медичній практиці неможливе без методів їх визначення [1]. Проте вони не завжди є раціональними і доцільними для всіх речовин даної групи. Тому, актуальним є розробка, дослідження і вдосконалення нових методів визначення вітамінів групи В як речовин які мають широкий спектр застосування. Метою роботи було ознайомлення з різними методиками та методами визначення вітамінів групи В, а також розроблення нових методів точного визначення концентрації вітамінів групи В потенціометричним методом.

Основне завдання: • синтезувати іонні асоціати як основи для іон-селективних електродів  
Одними із представників вітамінів групи В були: вітамін В<sub>1</sub> – тіамін та В<sub>6</sub> – піридоксин.

Вітамін В<sub>1</sub> (3-[(4-аміно-2-метил-5-піримідиніл) метил]-5-(2-гідроксиетил)-4-метилтіазолій хлорид) - дрібний кристалічний порошок білого або білого з жовтим відтінком кольору з специфічним запахом. Легко розчиняється у воді, малорозчинний у 96 % спирті, практично нерозчинний в ефірі, хлороформі та інших органічних розчинниках. Випускається вітамін В<sub>1</sub> у вигляді тіамін-хлориду,

тіамін-броміду. Речовини в кислому середовищі стійкі до дії світла, кисню повітря та високої температури.

Вітамін В6 (2-метил-3-окси-4,5-ди-(оксиметил)-піридину гідрохлорид ) - кристалічний порошок білого або майже білого кольору. Легко розчинний у воді, мало розчинний у 96 % спирті. Плавиться при температурі близько 2050 С із розкладанням. Розкладається при дії світла і УФ випромінювання.

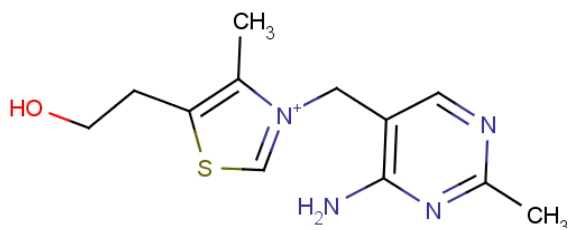


Рис.1. Структурна формула тіаміну

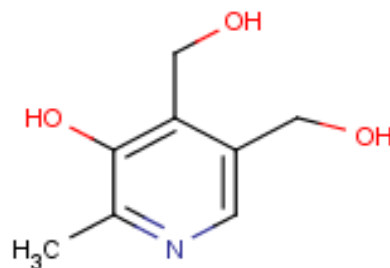


Рис.2. Структурна формула піридоксину

Встановлено, що вітаміни В<sub>1</sub> і В<sub>6</sub> здатні утворювати іонний асоціат (ІА) з багатьма барвниками такими як: бром феноловий синій, метилоранжевий, етиловий оранжевий, тропеолін 00, β-нафтолоранж, еозин Н, еозин В, йодеозин, алізарин S, бриліантовий жовтий. Отримані ІА можна використати як електродоактивну речовину (ЕАР) при виготовленні мембранного сенсору для їх визначення.

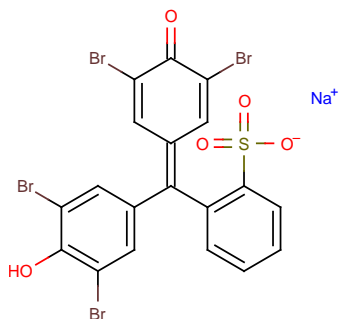


Рис.3. Бром феноловий синій

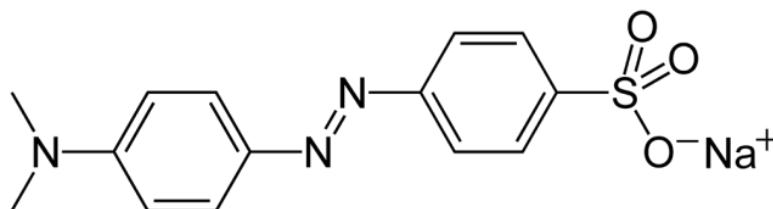


Рис.4 Метилоранж

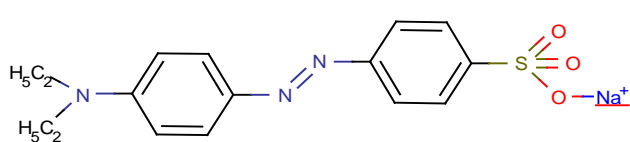


Рис.5. Етиловий оранжевий

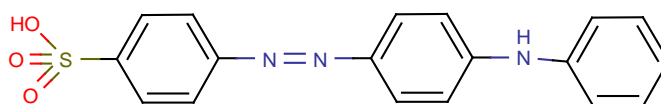


Рис.6. Тропеолін 00

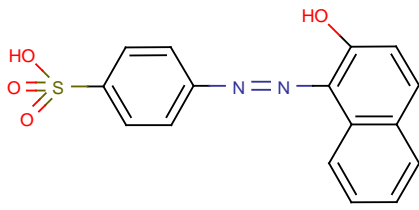


Рис.7.  $\beta$ -нафтолоранж

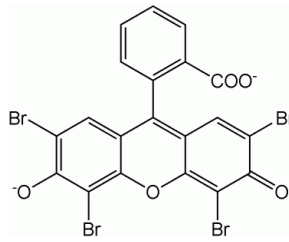


Рис. 8. Еозин H

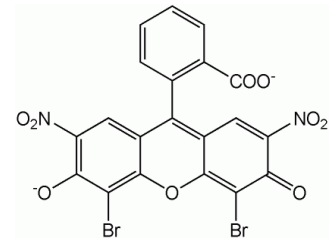


Рис.9. Еозин B

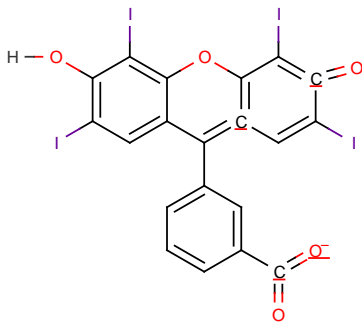


Рис.10. Йодеоозин

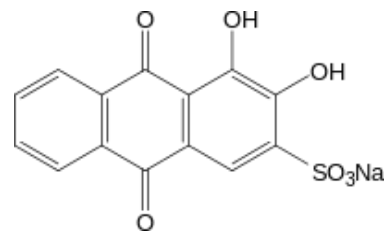


Рис.11 Алізарин S

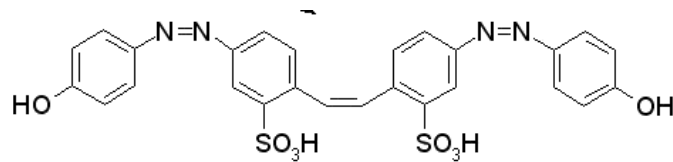


Рис.12. Бріліантовий жовтий

За допомогою синтезованих ІА будемо отримувати сенсори, з якими проведимо дослідження на встановлення: властивостей сенсора, як впливає на його властивості природа пластифікатора, кількість електроактивної речовини (ЕАР) та пластифікатора. Також необхідно встановити оптимальний склад полівінілхлоридних (ПВХ) вітамін-чутливих мембран на основі іонних асоціатів які були отримані. Крутизна електродної функції для найбільш оптимальної мембрани, лінійність електродної функції, нижню межу визначення. А також встановити селективність отриманого іон-селективного електроду на основі чутливих мембран.

#### Список літератури:

1. Антал И.П. / ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВИТАМИНОВ ГРУППЫ В // Антал И.П., Базель Я.Р., Кормош Ж.А. // Журн. аналит

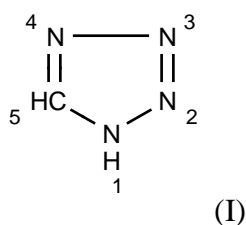
# МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ТЕТРАЗОЛІВ

Ритікова А. О.<sup>1</sup>, Савчук Т. І., Мазуренко І. В., Корольчук С. І., Супрунович С. В.,  
Кормош Ж. О.

хімічний факультет Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,  
e-mail: <sup>1</sup>anzhelika.rytikova@mail.ru

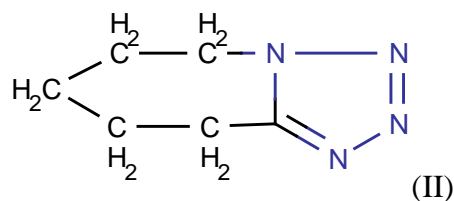
Актуальною є оптимізація процесу створення нових лікарських препаратів, що містять похідні тетразолів; пошук нових економічно вигідних умов їх синтезу. Із хіміко-аналітичної точки зору важливою є розробка нових ефективних методик для визначення тетразолів та їх похідних, що може бути реалізовано методами потенціометрії. Мета роботи - обґрунтувати можливість аналітичного застосування тетразолів та їх похідних.

Тетразоли – ароматичні сполуки, енергія делокалізації яких коливається в інтервалі 231,8 – 265 кДж/моль і значно перевищує енергію делокалізації інших п'ятичленних гетероциклів. Тетразол є типовою амфотерною сполукою, а атоми нітрогену легко вступають у різноманітні реакції за рахунок своїх неподілених електронних пар. Циклічна система з одним атомом карбону і чотирма атомами нітрогену виявилася досить стійкою до нагрівання, до дії кислот, основ, окисників і відновників. Номерація атомів тетразольного кільця відповідає загальним правилам, прийнятим для п'ятичленних гетероциклів [2]:



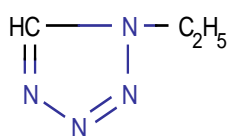
Похідні тетразолу отримали значне поширення в медицині. У даний час на фармацевтичному ринку представлені десятки високоефективних лікарських засобів, активні фармацевтичні інгредієнти (субстанції) яких, містять тетразольний цикл. Поряд з давно відомими препаратами, такими як антибіотики ряду цефалоспоринової (Cefazolin, Ceftezol), знайшли застосування тетразолвмісні лікарські засоби нового покоління, що володіють високою ефективністю і селективністю дії. Серед них гіпотензивні препарати (Losartan, Valsartan, Candesartan, Irbesartan), препарати з антиалергенною дією (Pranlucast, Tazanoplast, Pemioplast), діуретики (Azosemid), інгібітори тромбоутворення (Cilostazol) [1]. Серед них одним із найпоширеніших є кордіазол (коразол) – пентаметилентетразол, який є ефективним стимулятором центральної нервової системи і серцевої діяльності:





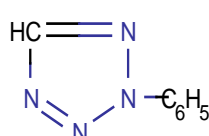
Незаміщений тетразол і його С-заміщені можуть існувати у двох таутомерних формах - 1Н-тетразол і 2Н-тетразол, проте переважає 1Н-таутомер. Для цього гетероциклу існує три ряди монозаміщених і два ряди дизаміщених похідних [3].

#### *Монозаміщені тетразоли*



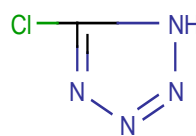
1-Етилтетразол

(III)



2-фенілтетразол

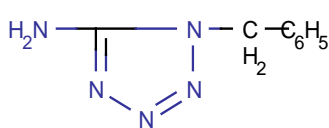
(IV)



5-хлортетразол

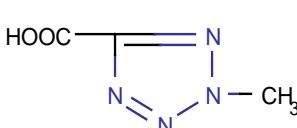
(V)

#### *Дизаміщені тетразоли*



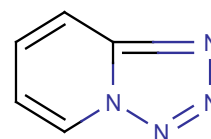
1-бензил-5-амінотетразол

(VI)



2-метилтетразолкарбонова-5 кислота

(VII)



Тетразолопіридин

(VIII)

Більшість тетразолів – кристалічні тверді речовини, але серед представників кожного моноциклічного ряду знайдені рідкі тетразоли. Температури кипіння і плавлення 2-монозаміщених тетразолів, як правило, нижчі, ніж у відповідних 1-монопохідних. 5-монозаміщені тетразоли плавляться, зазвичай, при значно вищих температурах, ніж 1- і 2-заміщені ізомери. Сам тетразол має температуру плавлення 156° С, кристалізується у вигляді триклінічної системи, легко розчиняється у воді і спирті, але важко в ефірі і бензолі [3].

Основним завданням є синтезувати іонні асоціати, як основи для іон-селективних електродів. За допомогою синтезованих ІА будемо отримувати сенсори, з якими проводитимемо дослідження на встановлення: властивостей сенсора (як впливає на його властивості природа пластифікатора, кількість електроактивної речовини (ЕАР) та пластифікатора). Також необхідно встановити оптимальний склад полівінілхлоридних (ПВХ) тетразол-чутливих мембран на основі іонних

асоціатів, крутизну електродної функції для найбільш оптимальної мембрани; лінійність електродної функції; нижню межу визначення.

**Список літератури:**

- 1.V.A. Ostrovskii, G.I. Koldobskii and R.E. Trifonov, Tetrazoles. In: Comprehensive heterocyclic chemistry III / A. R. Katrizky, C. A. Ramsden, E. F.V. Scriven, and R. J.K.Taylor // Elsevier: Oxford. – 2008. – Vol.6. – P. 257.
- 2.Иванский В. И. «Химия гетероциклических соединений» / В. И. Иванский: Учеб. Пос. для ун-тов. – М.: Высш. школа, 1978. – С. 559.
- 3.Эльдерфилд Р. Гетероциклические соединения / Р. Эльдерфилд, пер. с англ. Ящунского В.Г. - М.: Мир, т. 8. - 1969. - С. 364 .

# ВПЛИВ ДЖЕРЕЛ ІОНІЗУЮЧОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ НА РЕЧОВИНУ

## THE IMPACT OF IONIZING RADIATION SOURCES ON THE MATTER

### INVESTIGATION OF OPTICALLY STIMULATED LUMINESCENCE DECAYS FOR BETA-IRRADIATED KCl AND NaCl

**Renata Majgier<sup>1</sup>, Magdalena Biernacka<sup>2</sup>, Arkadiusz Mandowski<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>M. Sc., PhD student, Institute of Physics, Jan Dlugosz University in Czestochowa, Poland,  
e-mail: renata.majgier@ajd.czest.pl,

<sup>2</sup>M. Sc., Teaching Assistant, Institute of Physics, Jan Dlugosz University in Czestochowa, Poland,  
e-mail: m.biernacka@ajd.czest.pl,

<sup>3</sup>D. Sc., Associate Professor, Institute of Physics, Jan Dlugosz University in Czestochowa, Poland,  
e-mail: a.mandowski@ajd.czest.pl

Growing prevalence of radioactive isotope use in medicine and industry, as well as the possibility of dangerous radiation incidents resulting from malfunctions, or the potential risk of the nuclear weapon use, cause that radiological protection of people and environment is highly important. This aspect prompted us to search for cheap and commonly widespread materials which can be used as passive radiation detectors in places where standard radiation meters are not available. The sensitive luminescence method as Optically Stimulated Luminescence (OSL) can be applied in order to obtain information about dose absorbed by detector. Strong luminescence OSL signal observed from irradiated sodium and potassium chlorides makes these materials potentially interesting candidates for dosimeters. Nowadays potassium chloride was considered as X-ray imaging sensor and UV detector [1], whereas sodium chloride was studied for its application in dating and dosimetry [2].

The OSL method belongs to radiation induced luminescence phenomena and consists of lighting detector with strong light in visible or infrared range. Crucial role during optical stimulation play defects of crystalline structure which correspond to localized energy levels inside the band gap. These levels act as stable traps for charge carriers excited during irradiation. The light of stimulation causes the release of charge carriers located in traps and, as a result of radiative recombination, subsequent luminescence emission. Typically, the amount of light emitted during stimulation is proportional to the previously absorbed dose by the detector.

This work presents investigation of reproducibility of OSL decays for beta irradiated chlorides using different wavelength of stimulation. The samples were prepared from analytical quality sodium chloride or potassium chloride material, which was dissolved in distillate water and recrystallized (with presence of daylight). The single-grain crystals were colorless with white inclusions and grain size of 1-2 mm and masses  $2.3 \pm 0.1$  mg. Irradiation were made using laboratory  $^{90}\text{Sr}/^{90}\text{Y}$   $\beta$  source with an activity of 37 MBq.

The equipment used for measurements was custom-made OSL reader 'HELIOS-1' [3] and its modified version 'HELIOS-3'. The readers consist of interchangeable modules for stimulation (green, blue, IR) in the form LEDs with optical lenses. The stimulation in the 'Helios 1' reader was carried out using green LEDs (peak at 520-532 nm) and additional Schott filters GG495 and OG515 to cut-off short-wave light component below 500 nm. The stimulation in 'Helios 3' reader was made using blue LEDs (peak at 470 nm) with edge Schott filter GG455. Detection of luminescence was made by a modified integrated photon counting module H7360 (Hamamatsu) with quartz window, counter electronics and computer interface. Additional photosensor is applied in order to control the LEDs emission. Blue light emission (in the range 300-380 nm) can be detected as OSL signal using Schott UG11 filters. The reader is operated by the dedicated software on a PC. Using standard detectors  $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{C}$  (manufactured by Landauer, USA) the readers achieve very good sensitivity at the level of 0.01 mGy.

After beta irradiation the samples were stimulated by light with constant intensity and the emitted luminescence signal was recorded during time of stimulation (so called CW-OSL technique). Fig. 1–2 show CW-OSL decays using blue light stimulation of NaCl and KCl crystals previously irradiated with dose equal 0.63 Gy. The shape of decays for both chlorides seems to be similar, whereas the beginner intensity of OSL signal is generally greater for NaCl than KCl crystals. We observed small dispersion of OSL signals for the series of crystals for each type of chlorides despite persisting an identical measurement conditions and masses of the samples. Comparison the OSL decays from chlorides is depicted in the fig. 3 and 4. The results show influence of stimulation wavelength on the OSL response. The different shapes of OSL decays from NaCl and KCl may indicate complex structure of traps in these materials and/or occurrence of traps population with different sensitivity to a specific wavelength of stimulation light.

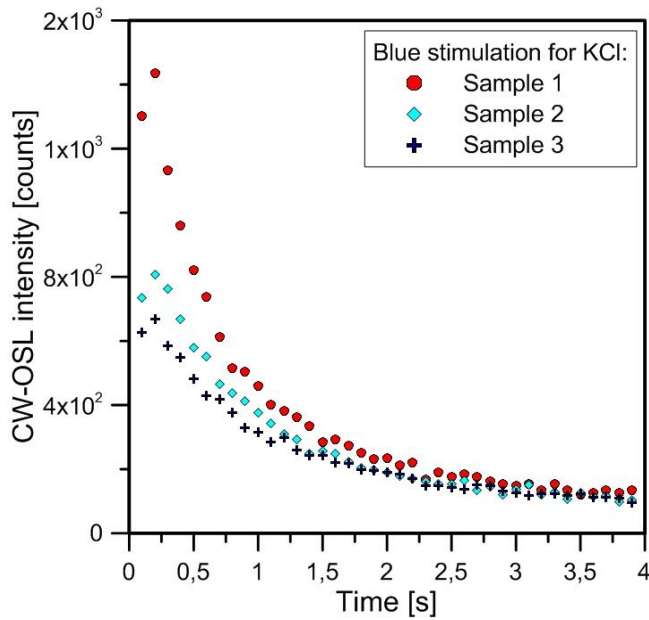


Fig. 1. CW-OSL decays for series of KCl samples. OSL readout time 4 s, sampling time 0.1 s,  $\lambda_{stim} = 470$  nm.

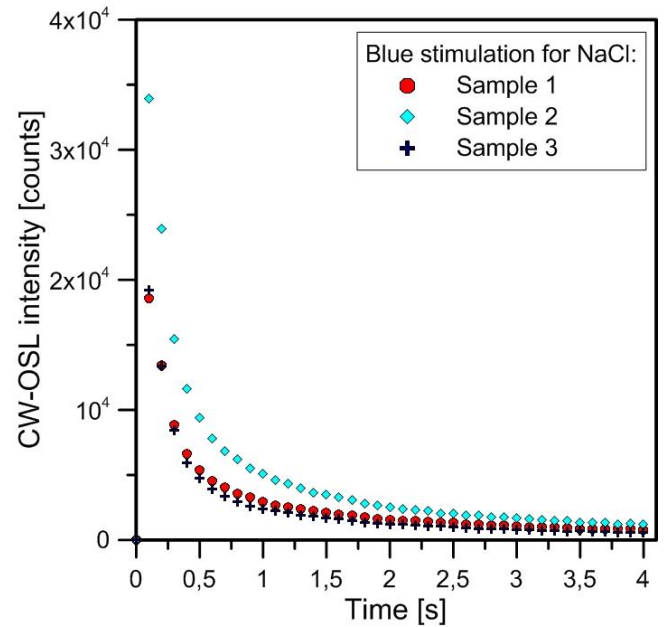


Fig. 2. CW-OSL decays for series of NaCl samples. OSL readout time 4 s, sampling time 0.1 s,  $\lambda_{stim} = 470$  nm.

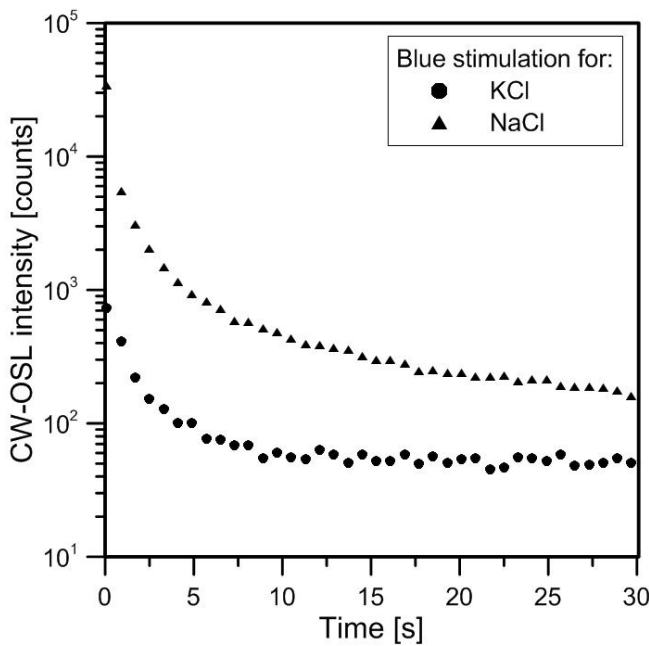


Fig. 3. CW-OSL decays for NaCl and KCl samples no 2. OSL readout time 30 s, sampling time 0.1 s,  $\lambda_{stim} = 470$  nm.

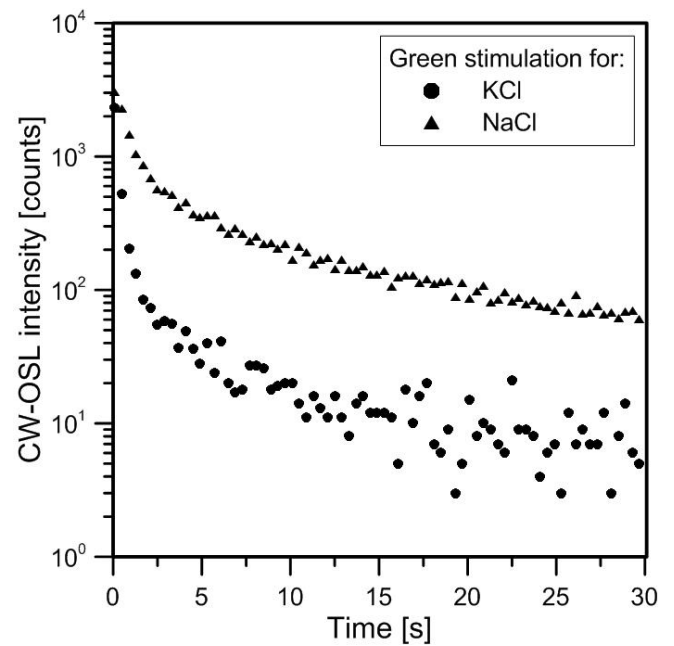


Fig. 4. CW-OSL decays for NaCl and KCl samples. OSL readout time 30 s, sampling time 0.1 s,  $\lambda_{stim} = 520$  nm.

Both NaCl and KCl crystals exhibiting strong OSL signal, are cheap and widely available. These features make them potential luminescent detectors. An important aspect in order to use the material in ionizing radiation dosimetry is the repeatability of the results. It is also significant for theoretical explanation of the luminescence mechanism in the material (kinetics of luminescence from NaCl and KCl are complex, there is no simple theoretical model expository them). With the purpose of obtaining

repeatable results, it is necessary to comply with fixed conditions of sample preparation, irradiation, storage (e.g. time between excitation and readout) and readout parameters.

**References:**

1. Nanto K., Murayama Y., Usuda S., Taniguchi N., Takeuchi N., *Optically Stimulated Luminescence in KCl:Eu Single Crystals*, Radiation Protection Dosimetry, 47, (1993), 281-284.
2. Bailey R.M., Adamiec G., Rhodes E.J., *OSL properties of NaCl relative to dating and dosimetry*, Radiation Measurements, 32, (2000), 717-723.
3. Mandowski A., Mandowska E., Kokot L., Bilski P., Olko P., Marczevska B., *Mobilny system wykrywania zagrożeń radiacyjnych przy użyciu mikrodetektorów OSL*, Elektronika, 51, (2012), 136-138.

УДК 539.104:537.311.33:621.315.5

## МОДЕЛІ БАГАТОФОКУСНИХ СТРУКТУР І РУХОМИХ НЕЛІНІЙНИХ ФОКУСІВ

**Березюк Г. І.**

аспірант Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,  
e-mail: bergena87@mail.ru

Коротко розглянемо основні результати теоретичних досліджень в яких були сформульовані моделі багатофокусних структур (БФС) [1] і рухомих нелінійних фокусів (РНФ) [2].

В роботі [1] розглядалося поширення світлового пучка з гаусовим початковим профілем інтенсивності в середовищі з безінерційною керрівською нелінійністю показника заломлення. На основі чисельного розв'язку хвильового рівняння

$$\frac{\partial^2 E}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial E}{\partial r} + 2ik \frac{\partial E}{\partial z} + n_2 k^2 |E|^2 E = 0 \quad (1)$$

де  $E$  - напруженість електричного поля світлового пучка,  $r$  і  $z$ - радіальна і лінійна координати ( $z$ -збігається з напрямком поширення пучка в середовищі),  $k$  - хвильове число,  $n_0$ - початковий показник заломлення середовища,  $n_2$  - коефіцієнт нелінійності показника заломлення,

$$n = n_0 + n_2 |E|^2 \quad (2)$$

було встановлено, що при потужності падаючого пучка  $P$ , що перевищує критичну потужність  $P_{cr} = cn_0 N_1^2 / 8n_2 k^2$ , де  $c$  - швидкість світла у вакуумі,  $N_1$  -числовий коефіцієнт, що дорівнює приблизно 2, хвилеводне поширення, запропоноване в деяких попередніх роботах не має місця, а утворюється багатофокусна структура.

Механізм формування багатофокусної структури полягає в тому, що в перший фокус в приосевій області пучка "відшаровується" лише частка початкової потужності пучка (близька до критичної потужності). Ця частка частково поглинається в нелінійному фокусі і частково дифрагує (після проходження фокуса) під відносно великими кутами до осі пучка. У решти світлового пучка, що пройшов з боків повз перший фокус, аналогічним чином "відшаровується" і формується другий нелінійний фокус і т.д. Таким чином, послідовне формування нелінійних фокусів є як би рекурентним.

Основними характеристиками моделі БФС являються положення нелінійних фокусів і критичні потужності, при яких вони утворюються [21]:

$$\xi_{fm} = \frac{\chi_m}{N_m} \frac{ka_0^{-2}}{\sqrt{P_0 / P_{cr}^{(m)} - 1}} \quad (3)$$

Розміри фокусів і їх відносне розташування по поздовжній координаті можуть залежати від додаткових фізичних явищ (нелінійне поглинання, іонізація і т.п.), які обмежують щільність світлової енергії в нелінійних фокальних областях. Однак, як показали теоретичні дослідження багатьох з цих ефектів, багатофокусна структура зберігається, тобто модель БФС є універсальною і може спостерігатися в багатьох фізичних умовах [3].

Очевидно, що для імпульсних пучків з плавною зміною потужності в часі положення нелінійних фокусів буде змінюватися відповідно до відношення (3) і буде функцією часу. З цього випливає, що у разі нестационарних світлових пучків повинна реалізовуватися модель рухомих нелінійних фокусів. Повне число фокусів у цій структурі в момент часу  $t$  визначається умовою  $P_0(t) > P_{cr}^{(m)}(t)$ . Рисунок 1 показує утворення багатофокусних структур рухомих нелінійних фокусів у керрівському середовищі.

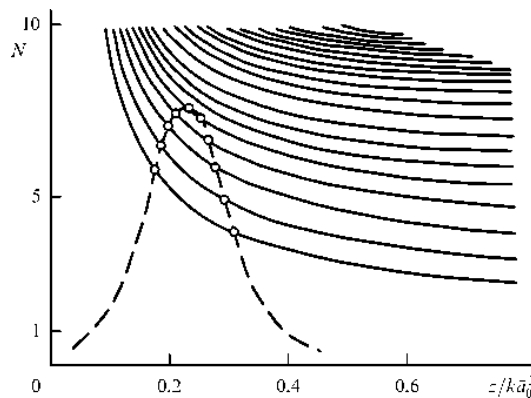


Рис. 1. Положення нелінійних рухомих фокусів

Положення нелінійних фокусів на осі пучка (суцільні криві) і форма імпульсу падаючого випромінювання  $N(t, z)$  (штрихова крива) зображені в координатах  $(z/ka_0^2, N)$ . Форма імпульсу  $N(t)$  дається виразом [21]

$$N(t, z) = \frac{1}{E_{cr}} \left| E_0 \left( t - \frac{ka_0^2}{v} \frac{z}{ka_0^2} \right) \right|, \quad (4)$$

Вперше модель рухомих нелінійних фокусів була запропонована Луговим і Прохоровим в роботі [2], потім її різні характеристики (зокрема, структура і швидкість руху нелінійних фокусів для випадку надкоротких лазерних імпульсів) детально досліджувалися [3].

Моделі багатофокусних структур і рухомих нелінійних фокусів були достовірно підтверджені в цілеспрямованих експериментальних дослідженнях самофокусування в різних середовищах із застосуванням різних підходів і методів реєстрації [4,5].

В роботі [4] досліджувалось самофокусування пучка рубінового лазера з тривалістю імпульсу 8 нс в толуолі і  $CS_2$ , спостерігалася еволюція пучка всередині і на вихідному торці кювети з досліджуваної рідиною при різному перевищенні потужності падаючого випромінювання над критичної потужністю. Аналіз результатів спостережень вказував на наявність руху нелінійних фокусів (детально досліджувалася еволюція першого нелінійного фокуса).

В обох роботах [4, 5] дослідження проводилися з використанням лазерів, що працюють в режимі модуляції добротності, в якому генерувалися стандартні імпульси, що відповідали нестационарному самофокусуванню.

В роботі [5] досліджувалось самофокусування в склі ТФ-105 пучка рубінового лазера з варіюючою часовою формою імпульсів. Такий підхід дозволив дослідити характер самофокусування як в нестационарному, так і в стаціонарному (випадок прямокутних імпульсів) режимах. Спостерігалось лазерне руйнування в зразках, досліджувалася його морфологія залежно від форми імпульсів. Результати цих досліджень були однозначно інтерпретовані в рамках моделей рухомих нелінійних фокусів та стаціонарних багатофокусних структур. Відзначимо, що підхід, що полягає у використанні лазерних імпульсів з варіюючою часовою формою в дослідженнях явища самофокусування, був запропонований і реалізований в роботі [5] вперше.

Отже, в результаті теоретичних досліджень встановлені основні закономірності і характеристики явищ самофокусування, загальні для різних оптичних середовищ. Запропоновані різні моделі процесу самофокусування з яких найбільш обґрунтованими є модель багатофокусних структур і рухомих нелінійних фокусів.

**Список літератури:**

1. Дышко А. Л., Луговой В. Н., Прохоров А. М. Письма в ЖЭТФ 6 655 (1967)
2. Луговой В. Н., Прохоров А. М. Письма в ЖЭТФ 7 153 (1968)
3. Луговой В. Н., Прохоров А. М. УФН 111 203 (1973)
4. Loy M. M., Shen Y.R. Phys. Rev. Lett 994 (1969)
5. Липатов Н. И., Маненков А. А., Прохоров А. М. Письма в ЖЭТФ 11 444 (1970)



## ВИЗНАЧЕННЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ РАДОНУ-222 В ПРИРОДНИХ ДЖЕРЕЛАХ ВОДИ ЗДОЛБУНІВСЬКОГО РАЙОНУ РІВНЕНЩИНИ

Лебедь О. О.<sup>1</sup>, Мислінчук В. О.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>старший викладач кафедри хімії і фізики

Національного університету водного господарства та природокористування, e-mail: lebed739@ukr.net

<sup>2</sup>кандидат педагогічних наук, доцент кафедри методики викладання фізики та хімії

Рівненського державного гуманітарного університету, e-mail: mislya@ukr.net

Радон-222 як джерело природної радіоактивності викликає значний інтерес з точки зору фізики, біології, екології, медицини, тощо [1; 2]. Останнє викликано тим, що він є членом радіоактивної родини урану-радію (сам радон –  $\alpha$ -активний), а наша країна є однією з найбагатших країн світу за покладами урану, які знаходяться в п'яти уранових провінціях (Карпатській, Волинсько-Подільській, Донецькій, Кримсько-Причорноморській, Українському щиті). Рівненська область і місто Рівне знаходяться в межах Українського щита і поклади ураніту (уранової руди) знаходяться зокрема під м. Рівне на глибині від 800 до 1200м.

За своїм агрегатним станом за нормальних умов радон є газом, тобто змішуючись з повітрям, він може проникати в легені людей і тварин, здійснюючи внутрішнє опромінення.

Відомо, що річна еквівалентна доза від природних джерел в районах з нормальним радіоактивним фоном при внутрішньому опроміненні становить  $1,34\text{мЗв/рік}$ , а вклад членів родини урану в ній –  $0,954\text{мЗв/рік}$ , причому вклад радону –  $0,930\text{мЗв/рік}$ . Якщо ж врахувати, що сумарна річна еквівалентна доза від зовнішнього і внутрішнього опромінення людини становить приблизно  $1,952\text{мЗв/рік}$ , то вклад в ній членів родини урану-радію становить 52%, а радону – 46,7%.

Радон добре розчиняється в воді і в розчиненому вигляді може переноситись водою. Концентрація радону в водопровідній воді надзвичайно мала, але вода з деяких джерел, особливо з глибоких колодязів або артезіанських свердловин, містить дуже багато радону. Такий високий вміст радону було виявлено, наприклад, у воді артезіанських колодязів у Фінляндії і США.

Метою наших досліджень було визначення об'ємної активності (ОА) радону в природних джерелах води Здолбунівського району (біля 40 джерел). Для цього в червні 2014 року була організована експедиція. Вимірювання ОА радону проводилось вимірювальним комплексом для моніторингу радону, торону і їх дочірніх продуктів "Альфарад плюс" (діапазон вимірювань по  $^{222}\text{Rn} - 1 - 2 \cdot 10^6 \text{Бк/м}^3$ ). Крім вимірювання ОА радону в місцях відбору проб здійснювались

вимірювання загального  $\gamma$ - фону,  $\beta$ - активності ґрунту за цезієм-137 і стронцієм-90, а також проводився хіманаліз ґрунту та води.

Дослідження показали, що при приблизно фоновому рівню  $\gamma$ - і  $\beta$ - випромінювань, значення ОА радону в воді природних джерел змінюється в широких межах від 2 до 14Бк/л (з похибкою в межах 1Бк/л для нижнього значення і 6Бк/л – для верхнього). Нанесені на карту Здолбунівського району значення ОА радону-222 показали, що  $ОА > 10Бк/л$  (аномальне підвищення концентрації радону в воді) в основному зосереджене у вузькій смузі в центральній частині району з півдня на північ. Зліва від цієї полоси ( $ОА < 5Бк/л$ ) – рівень концентрації радону в воді природних джерел є безпечним, а справа ( $5Бк/л < ОА < 10Бк/л$ ) – є шкідливим з точки зору можливості виникнення онкозахворювань.

**Список літератури:**

1. Несмеянов Ан. Н. Прошлое и настоящее радиохимии. – Л.: Химия, 1985. – 168 с.
2. Радиация. Дозы, эффекты, риск / перев. с англ. Ю. А. Банникова – М.: Мир, 1990. – 80 с.
3. Нефёдов В.Д. Радиохимия. – М.: Высшая школа, 1985. – 320 с.

УДК: 621.315.592

## **СУЧАЧНІ СЕНСОРИ РАДІАЦІЙНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ**

**Ойович М. Д.**

студент Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

e-mail: kalaka27@mail.ru

Техніка конструювання і застосування датчиків (сенсорика), за останні роки розвилася у самостійну галузь вимірювальної техніки. Для більшості фізичних величин існує багато різноманітних вимірювальних технологій, що характеризуються залежністю між сигналом на виході і вимірюваною величиною.

Датчик є елементом технічних систем, призначених для вимірювання, сигналізації, регулювання, управління приладами і процесами. Вони перетворюють величину, яка контролюється (тиск, температура, витрата, концентрація, частота, швидкість, переміщення, електрична напруга, електричний струм і т.д.) в сигнал (електричний, оптичний, пневматичний), зручний для вимірювання, передачі, перетворення, зберігання і реєстрації інформації про стан об'єкта вимірювання.

Одним із найсучасніших сенсорів радіаційного випромінювання є детектори нейтронного випромінювання. Для виготовлення такого детектора використовувалися кристали

ХІТ(халькогенід індіната талію) з питомим опором  $\sim 5 \cdot 10^6$  Ом · см. Такий матеріал забезпечує оптимальне відношення сигнал/шум детектора. Детектор являє собою однорідний зразок прямокутного перетину з розмірами  $\sim 1 \times 1 \times 7$  мм. На протилежні великі грані зразка нанесені два електричних контакти. Зразок поміщений в світлонепроникний алюмінієвий корпус діаметром 6 мм. Робоча напруга детектора 10 В. Дослідження і тестування детектора проводились на експериментальних пучках імпульсного дослідницького реактора ІБР-2 (ОІЯД, Дубна) з часопрелітною базою 8.5 м. Сигнал детектора без попереднього підсилення фіксувався на осцилографі. Великий ефективний атомний номер з'єднання ХІТ, а також значна величина рухливості на час життя нерівноважних носіїв заряду кристалів ХІТ ( $\mu\tau=10^{-2}\text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ ) роблять даний напівпровідник ефективним матеріалом для виготовлення детекторів жорсткої радіації. При цьому, завдяки особливостям будови анізотропної кристалічної решітки напівпровідника, зразки правильної геометричної форми з досконалою поверхнею виходять простим розколюванням. Це дозволяє виключити процедури шліфування та травлення, що є важливою технологічною гордістю детектора.

Висока чутливість детектора і малі розміри дозволяють проводити практично точкові вимірювання потоку нейтронів з метою, наприклад, дослідження рівномірності розподілу поля по поперечному перерізі пучків або для вибору оптимального місця розташування мішені в пучку.

Таким чином, описаний датчик, завдяки високій чутливості та малим розмірам, а також великому ресурсу роботи, може з успіхом застосовуватися для контролю потужних, тимчасових, а також просторових розподілів  $\gamma$ - і нейтронного випромінювання імпульсних дослідницьких реакторів.

# ОДЕРЖАННЯ ТА ВЛАСТИВОСТІ ТВЕРДОТІЛЬНИХ МАТЕРІАЛІВ

## OBTAINING OF SOLID-STATE MATERIALS AND THEIR PROPERTIES

УДК 621.315.592

### THERMOELECTRIC PROPERTIES OF PbSe-AgSbSe<sub>2</sub> SOLID SOLUTIONS

Neonila Bozhko<sup>1</sup>, Iryna Polishchuk, Olga Rosolovska

Lesya Ukrainka Eastern European National University, e-mail: <sup>1</sup>Neyelin@i.ua

Lead chalcogenides based on PbX, (X=S, Se, Te), widely used as functional materials thermoelectricity. One way to expand and improve the parameters of thermoelectric devices based PbX (X = S, Se, Te) is the use of solid solutions.

For the synthesis of alloys PbSe–AgSbSe<sub>2</sub> used simple matter of high purity: Ag – 99,99%; Sb – 99,999%; Pb – 99,999%, Se – 99,999% main component. Solubility based on PbSe and AgSbSe<sub>2</sub> for determined X-ray and differential thermal analysis. For the growth of single crystals of solid solutions of PbSe-AgSbSe<sub>2</sub> used horizontal Bridgman method. Single crystals of the solid solution based on PbSe corresponded component composition 0, 5, 8 mol% AgSbSe<sub>2</sub>. Single crystals of the solid solution based on component composition AgSbSe<sub>2</sub> corresponded 0, 10, 20, 30 and 40 mol% PbSe. Samples of 50 mol% PbSe were two-phase. Within the investigated solid solutions the dependence of the period of the unit cell of the composition of the solid solution. For example, for solid solutions based on PbSe she was in the range of  $a = 0.6126$  nm, for PbSe, to  $a = 0.6000$  nm for sample containing with 10 mol% AgSbSe<sub>2</sub>, and the unit cell volume of  $V = 0,230$  nm<sup>3</sup> to  $V = 0,227$  nm<sup>3</sup>, respectively. In our opinion, this is due to the replacement of two Pb<sup>2+</sup> into Ag<sup>+</sup> and Sb<sup>+</sup>.

Basic electric and thermoelectric parameters we have studied solid solutions in the table.

<i>Electric and thermoelectric properties of PbSe-AgSbSe<sub>2</sub></i>					
№	mol. % PbSe	Type conductivity	$\sigma, \text{Om}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$	$\alpha, \mu\text{W/K}$	$\alpha^2\sigma, 10^{-6} \text{ W/m}\cdot\text{K}^2$
1	100	p	350	220	17
2	95	n	33	60	0,12
3	92	p	22	180	0,71

<i>Electric and thermoelectric properties of PbSe-AgSbSe<sub>2</sub></i>					
4	40	p	0,01	1100	1,1
5	30	p	0,02	940	2
6	20	p	0,5	700	17
7	10	p	0,9	650	37
8	0	p	1,4	530	49

The sign of the thermoelectric coefficient ( $\alpha$ ) determine type conductivity. Change of conductivity ( $\sigma$ ) with the composition of the solid solution may be due to defects in the crystal lattice of single crystals. The maximum value of the thermoelectric power ( $\alpha^2\sigma$ ) have crystals AgSbSe<sub>2</sub>.

We calculated thermoelectric figure of merit:

$$Z = \frac{\alpha^2 \sigma}{\chi_{\text{tot}}}$$

Because the quality factor has dimension  $K^{-1}$ , in practice use dimensionless figure of merit  $ZT$ , where  $T$  - the absolute temperature. For PbSe was 0.42. In the calculations it was considered that the thermal conductivity ( $\chi_{\text{tot}}$ )  $\sim 1,2 \cdot 10^{-2}$  W/(K·cm). For AgSbSe<sub>2</sub> calculated values  $ZT \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$ , with a coefficient  $\chi_{\text{tot}} \approx 0,6 \cdot 10^{-2}$  W/(K·cm)

#### **References:**

- 1.Kumar R.S., Sekar A., Victor Jaya N., Natarajan S.Synthesis and high pressure studies of the semiconductor AgSbSe<sub>2</sub>// J. Alloys Compd. № 1-2(285), 1999. – P. 48–50.
- 2.Maksymilian Schmidt, Rafal Zybal, Krzysztof T. Wojciechowski. Structural and Thermoelectric Properties of AgSbSe<sub>2</sub>-AgSbTe<sub>2</sub> System // Ceramic Materials. № 4(62), 2010. – P. 465–470.
- 3.Growth mechanism and thermoelectric properties of PbTe/SnTe/PbTe heterostructures // E.I. Rogacheva, S.N. Grigorov, O.N. Nashchekina, [at al.] / Thin Solid Films – 2005. – Vol.493, №1-2. – P. 41–48.
- 4.Rowe D. M. Handbook of thermoelectrics. / D. M. Rowe. – New. York : CRC Press, 1995. – 703 p

УДК 621.315.592

## **ОДЕРЖАННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МОНОКРИСТАЛА Ag<sub>2</sub>CdSnS<sub>4</sub>**

**Данильчук С. П.<sup>1</sup>, Апшай В. С.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>вчитель фізики ЛНВК ЗОШ І-ІІ ст. №7 – природничий ліцей, e-mail: s.danilchuk@gmail.com,

<sup>2</sup>учень 10 кл. ЛНВК ЗОШ І-ІІ ст. №7 – природничий ліцей

Основним завданням матеріалознавства є створення дешевих матеріалів електронної, оптоелектронної і нелінійної оптики з прогнозованими властивостями. До таких матеріалів

відносяться трьох- та чотирьохкомпонентні халькогенідні сполуки, фізичні властивості яких варіюються разом з компонентним складом. Нецентросиметричність кристалічної структури, широкий спектральний інтервал вікон прозорості роблять їх перспективними матеріалами нелінійної оптики.

Метою нашої роботи було дослідити структурні та електричні властивості монокристалу  $\text{Ag}_2\text{CdSnS}_4$ .

На діаграмі стану  $\text{Ag}_2\text{SnS}_3 - \text{CdS}$  [1] у співвідношенні 1:1 при температурі 1068 К утворюється сполука  $\text{Ag}_2\text{CdSnS}_4$ . Ріст монокристалів здійснювали горизонтальним методом Бріджмена. Полікристалічний сплав, заздалегідь синтезований з високочистих елементів (чистотою не меншою 99,99 мол.% основного компонента), запаювався у вакуумовану кварцову ампулу, яка поміщалася у ростову піч. Після нагрівання до 1200 К розплав гомогенізували 4 години і починали переміщення ампули зі швидкістю 2 см/добу. Температурний градієнт на фронті кристалізації становив  $\sim 14$  К/см. Після досягнення ізотермічної зони (800К) кристал відпалювали упродовж 250 год., і потім охолоджували до кімнатної температури зі швидкістю 100 К/добу. У результаті отримували монокристалічні блоки із розмірами  $\sim (20 \times 10 \times 6)$  мм<sup>3</sup> (рис. 1).

	Формула	$\text{Ag}_2\text{CdSnS}_4$
	Просторова група	$\text{Cmc}_21$
	a (нм)	0.41015 (3)
	b (нм)	0.70224 (4)
	c (нм)	0.66946 (4)
	Об'єм елементарної комірки (нм <sup>3</sup> )	0.19282 (4)
	Кількість атомів в елементарній комірці	8.0
	Розрахована густина (г/см <sup>3</sup> )	4.9521 (9)
	Випромінювання і довжина хвилі(нм)	Cu 0.154178
	Дифрактометр	ДРОН 4-13
Рис 1. Зовнішній вигляд монокристалів	Параметри кристалічної структури	

Структурні дослідження отриманих сполук проводилися рентгенівським методом порошку на дифрактометрі ДРОН 4 – 13. Параметри кристалічної структури  $\text{Ag}_2\text{CdSnS}_4$  представлено в таблиці.

З оптичних досліджень випливає, що дані монокристали є дефектними напівпровідниками [2].

При великій концентрації структурних дефектів, енергетичні рівні в забороненій зоні утворюють зону локалізованих дефектних станів, які закріплюють рівень Фермі у положенні між заповненими і незаповненими станами. Висока густина станів локалізованих поблизу рівня Фермі є відповідальною за більшість електричних процесів, що протікають в напівпровідниках [3].

На рис. 2 представлена температурна залежність темної питомої електропровідності монокристалів  $\text{Ag}_2\text{CdSnS}_4$ , які, згідно знаку коефіцієнта термо.-е.р.с. є напівпровідниками n-типу провідності.

Температурна залежність темної питомої електропровідності монокристалів  $\text{Ag}_2\text{CdSnS}_4$  носить експоненціальний характер і визначається формулою:

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-E_A/kT) \quad (1),$$

де  $\sigma_0$  - передекспоненційний множник, який в неупорядкованих напівпровідниках залежить від механізму електропровідності.

В області низьких температур I ( $T \leq 140\text{K}$ ) електропровідність зразків має мале значення  $\sim 10^{-11} \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$  і слабо залежить від температури (з енергією активації  $\sim (0,05 - 0,03) \text{ eV}$ , що є характерним для неупорядкованих систем для стрибкової активаційної провідності з перескоками електронів між найближчими сусідами біля рівня Фермі в зоні локалізованих дефектних станів [4].

Активаційний характер електропровідності не змінюється і в області більш високих температур II ( $T > 190\text{K}$ ), Але змінюються параметри температурної залежності  $\sigma(T)$  (рис. 2).

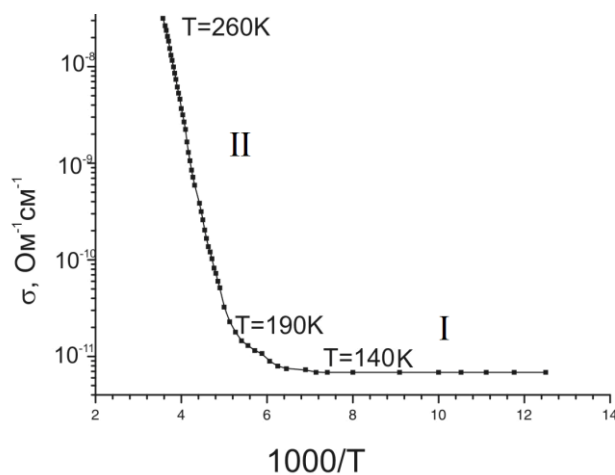


Рис. 2. Температурна залежність темної питомої електропровідності монокристалів  $\text{Ag}_2\text{CdSnS}_4$

Визначена із експериментальних даних, з використанням формули (1), енергія активації  $\sigma$  при високих температурах виявилася рівною  $E_A = (0,42 \pm 0,02) \text{ eV}$ , при цьому розрахований нами множник  $\sigma_0$  приймав значення  $\sigma_0 \approx 5 - 10 \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$ .

Значення передекспоненціального множника  $\sigma_0$ , згідно критерію Мотта [4] для неупорядкованих систем, свідчить про збудження носіїв з зони локалізованих станів поблизу рівня Фермі в нелокалізовані стани зони провідності. Висока енергія активації електропровідності монокристалів  $\text{Ag}_2\text{CdSnS}_4$  в області  $T > 190 \text{ K}$  може мати практичне використання для побудови чутливих термодатчиків, регуляторів температури і ін.

#### Список літератури:

1. Parasyuk O. V. The  $\text{Ag}_2\text{SnS}_3\text{-CdS}$  System / O.V. Parasyuk, L.V. Piskach // Polish J. Chem. – 1998. V.72, №5. – P. 966 – 968.
2. G. E. Davydyuk  $\text{Ag}_2\text{CdSnS}_4$  single crystals as promising materials for optoelectronic / G. E. Davydyuk, G. L. Myronchuk, I. V. Kityk, S. P. Danylchuk, V. V. Bozhko, O. V. Parasyuk // Optical Materials. – 2011. V.33. – P. 1302–1306.
3. Photoelectrical properties and the electronic structure of  $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_x\text{-xSn}_x\text{Se}_2$  ( $x = 0, 0.1, 0.2, 0.25$ ) single crystalline alloys / G. E. Davydyuk, O. Y. Khyzhun, and o. // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2013. – V.15. – P.6965-6972.
4. Мотт Н. Электронные процессы в некристаллических веществах / Мотт Н., Девис Э. – М.: Мир. – 1974. – 472с.

## ТЕРМІЧНО СТИМУЛЬОВАНА ПРОВІДНІСТЬ МОНОКРИСТАЛІВ ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ $Tl_{1-x}In_{1-x}Sn_xSe_2$ ( $x=0,1-0,25$ )

Данильчук С. П.<sup>1</sup>, Ілюшко Н. В.<sup>2</sup>, Герасимюк Ю. А.<sup>3</sup>, Божко В. В.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>інженер Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: s.danilchuk@gmail.com

<sup>2</sup>студентка III курсу Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

<sup>3</sup>студентка V курсу Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

<sup>4</sup>кандидат фізико-математичних наук, професор кафедри фізики твердого тіла та інформаційно-вимірювальних технологій Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки

В останні роки у фізиці напівпровідників спостерігається посилений інтерес до кристалічних матеріалів, котрі виявляють яскраво виражені анізотропні властивості. До таких матеріалів відносяться, зокрема, шаруваті сполуки класу  $A^III B^III C_2^{VI}$ . Кристали  $Tl_{1-x}In_{1-x}Sn_xSe_2$  ( $x=0,1-0,25$ ) є типовими представниками даного класу. Для них характерна наявність структурних дефектів, таких як вакансії й дислокації. За даними рентгеноструктурного аналізу [1], основну частину дефектів у твердих розчинах системи  $Tl_{1-x}In_{1-x}Sn_xSe_2$  ( $x=0,1-0,25$ ) складають вакансії талію, концентрація яких збільшується із збільшенням значення параметра  $x$ .

Флуктуація концентрації заряджених дефектів веде до порушення далекого порядку й появи випадкового електричного поля, що зумовлює виникнення зон локалізованих і делокалізованих станів у забороненій зоні сполуки. В твердих розчинах порушується трансляційна інваріантність кристалічної решітки, і, як наслідок, додатково виникають локалізовані стани з енергіями, які потрапляють в інтервал значень заборонених в ідеальному кристалі. Пастки породжені різними дефектами в кристалах грають основну роль в явищах переносу заряду [2].

Для одержання значень енергетичного спектру рівнів прилипання носіїв заряду монокристалів твердого розчину  $Tl_{1-x}In_{1-x}Sn_xSe_2$  в діапазоні температур 77 – 300 К було досліджено спектри термостимульованої провідності. Для цього попередньо охолоджені до  $T=77$  К зразки протягом 30 хв. опромінювались світлом з  $\lambda = 660$  нм, в цей час відбувалось заповнення пасток електронами. Після чого лазер виключався і починався нагрів кристала до кімнатної температури зі швидкістю 0,025 К/с. В результаті чого на кривих термостимульованої провідності (ТСП) спостерігались максимуми, які відповідають за звільнення електронів з пасток (рис. 1).

На рис. 1 представлено криві термостимульованої провідності твердого розчину різних кількісних складів.

У загальному випадку форма кривих ТСП досить складна, в літературі аналізується початок наростання струму, його максимум, спад, ширина, тощо.



На початковому етапі іонізації пастки, експериментальна залежність  $\sigma(T)$  носить експоненційний характер. Для оцінки енергії залягання рівня прилипання використали формулу, яка не залежить від типу рівня прилипання [3]:

$$\sigma = \text{const} \exp(-E_t/kT),$$

де  $\sigma$  відповідає початку максимуму ТСП.

За нахилом  $\ln(\sigma)=f(1/T)$  оцінюємо енергію  $E_t$ . Недоліком цього методу є те, що початкова ділянка максимуму ТСП часто спотворюється іншими (що близько лежать) рівнями прилипання.

Для більш точного визначення параметрів рівнів прилипання необхідно знати тип рівнів прилипання. Аналіз форми піків ТСП показує [4], що для всіх спостережуваних піків виконується умова:

$$\delta > e^{-1} \left( 1 + \frac{2 \cdot k \cdot T_m}{E_t} \right).$$

Величина  $\delta$  знаходиться з умови за формулою:

$$\delta = \frac{T_m - T_1}{T_2 - T_1},$$

де  $T_m$  – температура, при якій ТСП досягає свого максимального значення;

$T_1, T_2$  – температури, які відповідають половині максимуму ТСП зі сторони низької і високої температури.

Виконання цієї умови вказує на наявність в кристалі швидких центрів прилипання.

Енергія залягання пастки визначається формулою:

$$E_t = \frac{k \cdot T_m^2}{T_m - T_1}$$

Результати обрахунків представлені у табл. 1.

Таблиця 1. Глибина залягання рівнів прилипання монокристалів  $Tl_{1-x}In_{1-x}Sn_xSe_2$

Зразок	$x=0,10$	$x=0,20$	$x=0,25$
$E_t$ , eВ	0,08	0,12	0,22

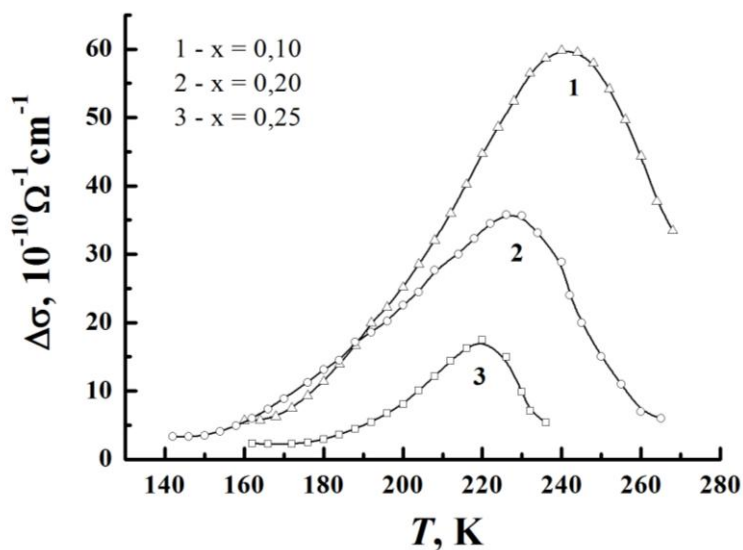


Рис. 1. Спектри ТСП монокристалів  $Tl_{1-x}In_{1-x}Sn_xSe_2$  (швидкість нагрівання 0,025 K/c)

Значення енергії іонізації рівнів прилипання добре узгоджується з результатом авторів роботи [5].

Методом термічно стимульованої провідності, встановлено тип рівнів прилипання і проведена оцінка енергії залягання цих рівнів.

**Робота виконана за підтримки Міністерства освіти та науки України (Договір М/106-2014 від 23.06.2014).**

**Список літератури:**

1. Phase diagram of the quasi-binary system  $\text{TlInSe}_2\text{-SnSe}_2$  / M.Yu. Mozolyuk, L.V. Piskach and o. // Journal of Alloys and Compounds. – 2011, V.509 – P.2693–2696.
2. Оптичні властивості кристалів системи  $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}_2$  ( $x=0; 0,10; 0,20; 0,25$ ) / Г. Є. Давидюк, Г. Л. Мирончук та ін. // Наук. віс. Волин. нац. ун-ту ім. Лесі Українки. – 2012. – № 16. – С. 19 – 24.
3. G. F. T. Garlic The Electron Trap Mechanism of Luminescence in Sulphide and Silicate Phosphors / G. F. T. Garlic, A. F. Gibson // Phys. Soc. A. – 1948. – V. 60. – P. 574 – 590.
4. P. G. Litovchenko. Актуальне вопросы физики полупроводниковых приборов / P. G. Litovchenko, V. I. Ustianov. – Wilnius, Mokslas, – 1960. – С. 153.
5. Photoelectrical properties and the electronic structure of  $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}_2$  ( $x = 0, 0.1, 0.2, 0.25$ ) single crystalline alloys / G. E. Davydyuk, O. Y. Khyzhun and o. // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2013. – V. 15. – P. 6965 – 6972.

УДК 539.261

## **СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ НАНОЧАСТИНОК СУЛЬФІДУ ЦИНКУ**

**Данілевська Н. Б.<sup>1</sup>, Нечипорук Б. Д.<sup>2</sup>, Новоселецький М. Ю.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>ведучий спеціаліст ООО «Трубосталькомплект», e-mail: Vodya-54@mail.ru,

<sup>2</sup>кандидат фізико-математичних наук, доцент

Рівненського державного гуманітарного університету,

<sup>3</sup>кандидат фізико-математичних наук, доцент

Рівненського державного гуманітарного університету

Нанорозмірні частинки, характеризуються аномальними фізико-хімічними властивостями порівняно з об'ємним зразком такого самого хімічного складу. Зокрема при переході до нанорозмірних частинок відбуваються суттєві зміни електричних, магнітних, оптичних, каталітичних та інших властивостей. Ці властивості роблять їх перспективними матеріалами для використання в мікроелектроніці, оптоелектроніці нелінійній оптиці та в інших галузях [1].

Сульфід цинку (ZnS) належить до прямозонних напівпровідникових матеріалів з шириною забороненої зони 3,68 eV за кімнатної температури і може бути використаний в різноманітних фотоелектронних пристроях, зокрема для виготовлення емісійних діодів і лазерів, що працюють у

синьо-зеленій області спектру, вікон гетероперехідних сонячних елементів [2]. Для отримання наночастинок ZnS використовують різноманітні методи такі як: молекулярно-пучкова епітаксія, використання розчинів, методи колоїдної хімії, тощо.

Метою даної роботи є дослідження фізичних властивостей наночастинок ZnS отриманих електролітичним методом.

Наноструктурований сульфід цинку був отриманий електролітичним методом в скляному електролізері з цинковими електродами розмірами: діаметр - 8 мм і висота - 200 мм. В якості електроліту використовувався розчин тіосульфату натрію в дистильованій воді з концентрацією 39 г/л. Процес електролізу проводився за кімнатної температури (25 °C). Тривалість експерименту складала 2 год., при густині струму  $2,54 \cdot 10^{-2}$  А/см<sup>2</sup>. Живлення електролізера здійснювалося від регульованого стабілізованого джерела постійного струму. Для рівномірного використання цинкових електродів здійснювався реверс напряму постійного струму. Час реверсу складав 30 хв.

Після закінчення електролізу електроліт, фільтрували за допомогою паперового фільтру і отриманий порошок промивали п'ятикратним об'ємом дистильованої води. Зразки висушували на повітрі при кімнатній температурі. В кожному експерименті визначали масу цинкових електродів і масу отриманого порошку.

Іонометр И-130 М був використаний для визначення рН електроліту, значення якого відповідно на початку і в кінці процесу отримання наночастинок складало 8,1 і 8,5. Рентгенівські дослідження проводилися на рентгенівського дифрактометрі ДРОН – 4 з використанням  $\text{CuK}\alpha$  випромінювання при кімнатній температурі. Вимірювання спектрів пропускання електроліту після закінчення процесу електролізу здійснювалися на спектрофотометрі Carry-50 за кімнатної температури.

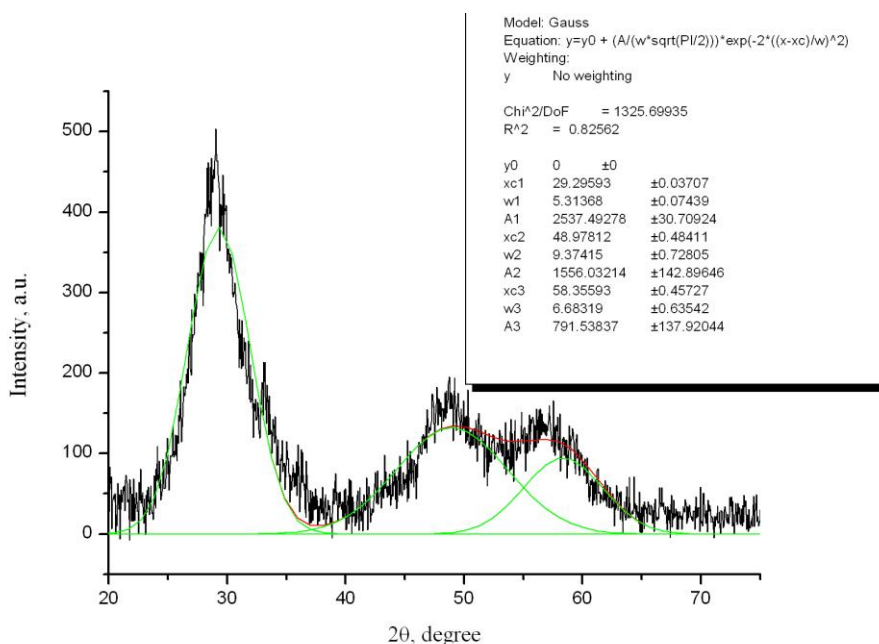


Рис.1. Рентгенівська дифрактограма порошку ZnS і її розклад на гаусові компоненти.

На рис.1. показано рентгенівську дифрактограму сульфїду цинку отриманого на протязі 2 год. з реверсуванням напрямку постійного струму через 30 хв. за кімнатної температури електроліту. З останньої видно, що на ній присутні три широкі рефлекси, що свідчить про малі розміри отриманих частинок. Для аналізу отриманої дифрактограми була використана прикладна програма OriginPro 7.0 за допомогою якої експериментальна дифрактограма була розкладена на три смуги, які описуються функцією Гауса. Таким чином була отримана інформація про три рефлекси: значення кута  $2\theta$ , півширина  $\beta$  (ширина на половині висоти рефлексу) і інтегральна інтенсивність. На основі отриманої інформації і розрахунку за допомогою формули Вульфа-Брега  $d \sin\theta = k\lambda$ , було встановлено, що були отримані рефлекси від таких площин (111) ( $2\theta = 29,30$ ), (220) ( $2\theta = 48,98$ ), (311) ( $2\theta = 58,36$ ). Це відповідає кубічній структурі – типу сфалерит. Таким чином нами отримані нанокристали ZnS кубічної системи.

Розміри зразків сульфїду цинку визначені на основі формули Дебая-Шеррера [3]

$$D = \frac{k\lambda}{\beta \cos\theta} \quad (1)$$

Тут  $k$  – коефіцієнт, значення якого залежить від форми частинки ( $k = 0.89$ );  $\lambda$  – довжина хвилі рентгенівського випромінювання;  $\beta$  – півширина – ширина на половині висоти рентгенівського рефлексу – фізичне значення півширини;  $2\theta$  – кутове положення рентгенівського рефлексу.

Фізичне значення півширини обчислено за формулою

$$\beta = \sqrt{\beta_1^2 - \beta_2^2}, \quad (2)$$

де  $\beta_1$  – експериментальне значення півширини рентгенівського рефлексу;  $\beta_2$  – інструментальне значення півширини рентгенівського рефлексу.

Інструментальне значення півширини рентгенівських рефлексів визначалося на основі аналізу рентгенівських дифрактограм для еталонного порошку кремнію і  $Al_2O_3$ , які були зареєстровані при тих самих умовах. Проведені розрахунки показали, що для різних рефлексів були отримані різні результати, а їх середнє значення складає величину порядку 1,21 нм.

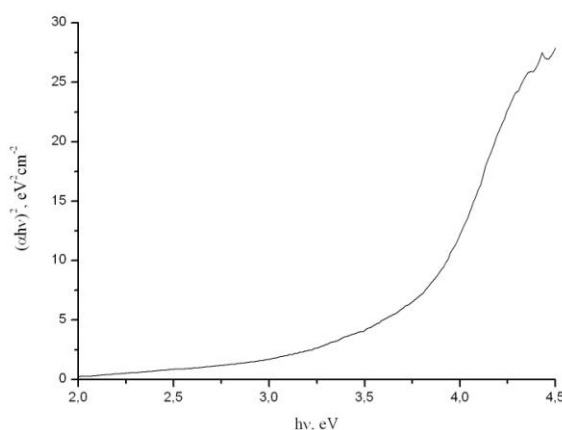


Рис. 2. Залежність величини  $(ahv)^2$  від енергії фотона  $hv$

Після закінчення процесу отримання наночастинок сульфїду цинку частина електроліту була використана для вимірювання спектрів пропускання. Вимірювання спектрів пропускання проводилося на спектрофотометрі Cary-50 за кімнатної температури. ZnS належить до прямозонних напівпровідників, а тому для визначення ширини забороненої зони з спектрів пропускання були розрахована величина  $\alpha hv$ , де  $\alpha$  – коефіцієнт поглинання,  $h$  – стала Планка і  $\nu$  частота фотона. Був побудований графік залежності величини  $(\alpha hv)^2$  від енергії фотона  $h\nu$  і з прямолінійної ділянки знайдено ширину забороненої зона, яка складає 3,71 eV (Рис. 2).

**Список літератури:**

1. Діденко О.З., Стрижак П.Є., Космамбетова Г.Р., Кальчук Н.С. Синтез і морфологія низько розмірних квантових систем ZnO/MgO Фізика і хімія твердого тіла Т. 10, №1, 2009, С. 106-111.
2. Курбатов Д., Опанасюк А., Опанасюк Н., Данильченко С. Структурні та оптичні характеристики плівок сульфїду цинку, отриманих методом квазізамненого об'єму. Вісник Львівського університету. Серія фізична. 2008, Вип. 42, С. 108-118.
3. Камерон и Паттерсон Рентгенографическое определение размеров частиц. – УФН, Т. XXII, вып. 4, 1939. – С. 442-448.

УДК 621. 315. 592

## КІНЕТИКА ФОТОПРОВІДНОСТІ В КРИСТАЛАХ $Ag_2In_2Si(Ge)Se_6$

**Замуруєва О. В.<sup>1</sup>, Кадлубицкий А. О.<sup>2</sup>, Мирончук Г. Л.<sup>3</sup>, Вілюс Вертяліс<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>аспірант Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

e-mail: zamurueva.o@gmail.com,

<sup>2</sup>студент Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

<sup>3</sup>кандидат фізико-математичних наук, доцент

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

<sup>4</sup>студент Вільнюського університету, Литва

В останні роки халькогенідні напівпровідникові сполуки групи  $A^I B^{III} X_2^{VI}$  привернули увагу завдяки їх можливому застосуванню, як матеріалів, що діють у видимій та інфрачервоній області спектру [1, 2]. Експериментальні результати показують, що фізичні властивості цих кристалів визначаються здебільшого точковими дефектами кристалічної решітки [3]. Використання твердих розчинів на основі сполук групи  $A^I B^{III} X_2^{VI}$  дає можливість розширити межі їх практичного застосування в оптоелектроніці [4, 5].

В роботі представлені експериментальні дані кінетики фотопровідності  $Ag_2In_2Si(Ge)Se_6$ . Кристали вирощенні методом Бріджмена-Стокбаргера. Вимірювання кінетики ФП здійснювалось в температурному інтервалі  $T=77 - 300K$  при збудженні зразка світлом з домішкової області.

При збудженні прямокутними імпульсами релаксаційні процеси мають складний довготривалий характер, який можна пояснити наявністю неоднорідностей в кристалах твердих розчинів  $Ag_2In_2Si(Ge)Se_6$ .

Релаксація домішкової ФП описується за експоненціальним законом, при цьому час для кінетики наростання  $\tau_n$  менший за час кінетики спаду  $\tau_c$ , що призводить до асиметрії кривих. Вказані особливості кінетики наростання та спаду ФП для кристалів  $Ag_2In_2Si(Ge)Se_6$  представлені на (рис. 1 – 2).

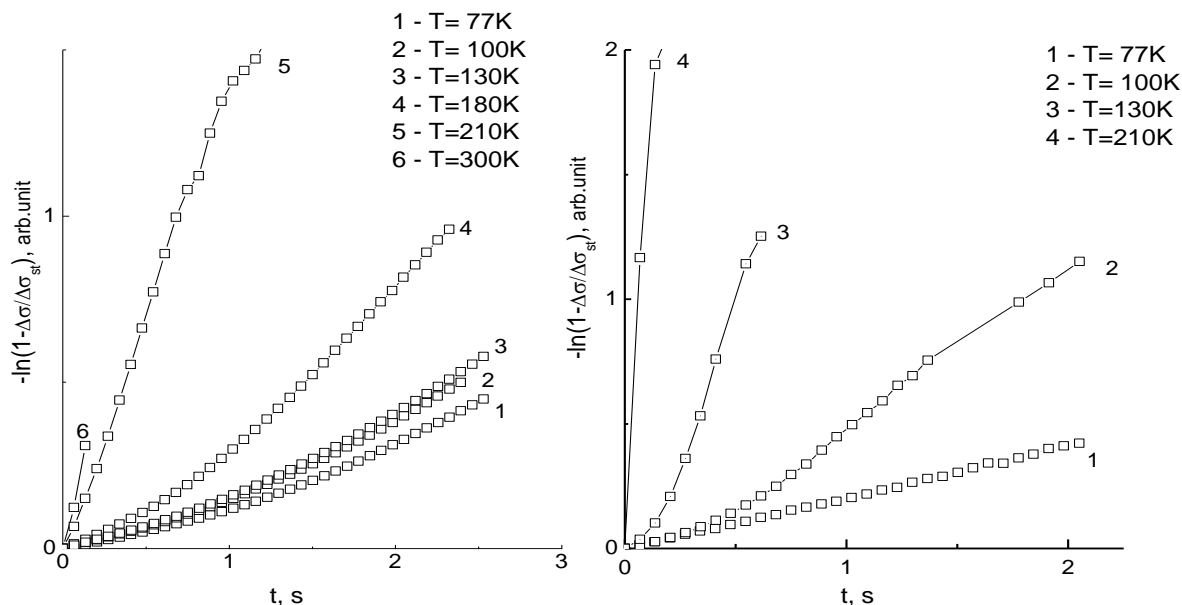


Рис. 1. Кінетика наростання фотопровідності в кристалах  $Ag_2In_2SiSe_6$  і  $Ag_2In_2GeSe_6$  при різних температурах

Кінетика наростання і спаду ФП для кристалів  $Ag_2In_2Si(Ge)Se_6$  має складний часовий характер. При домішковому збудженні в напівпровідниках криві наростання описуються рівнянням [6]:

$$\Delta\sigma = \Delta\sigma_{st} \cdot (1 - \exp(-\frac{t}{\tau_1})) \quad (1),$$

де  $\Delta\sigma_{st}$  – стаціонарна нерівноважна провідність,  $\tau_1$  – час релаксації фотопровідності після початку освітлення. Великі значення  $\tau_1$  ( $\sim 10^1$ с) говорять про участь в релаксації ФП пасток: рівнів прилипання, рекомбінаційних рівнів або рекомбінаційних бар'єрів.

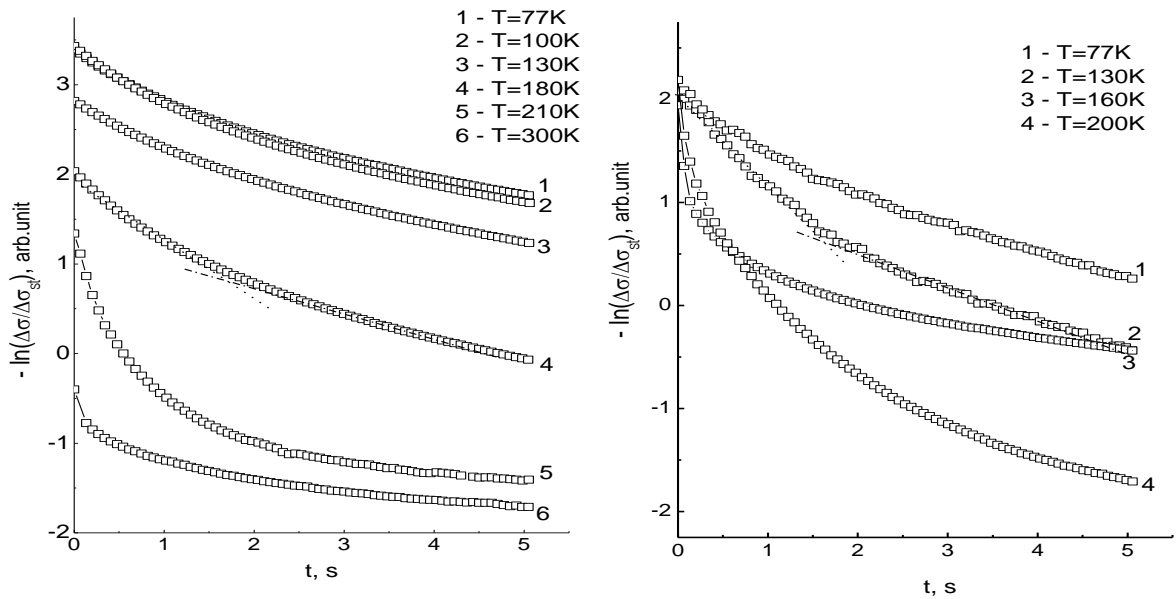


Рис. 2. Кінетика спаду фотопровідності в кристалах  $Ag_2In_2SiSe_6$  і  $Ag_2In_2GeSe_6$  при різних температурах

Після виключення засвітки спостерігається кінетика спаду ФП, де можна виділити дві прямолінійні ділянки, що характеризують наявність двох каналів рекомбінації нерівноважних носіїв заряду. Процес релаксації в такому випадку описується сумою двох експонент:

$$\Delta\sigma = A \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_3}\right) + B \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_4}\right) \quad (2),$$

де  $A \approx B \approx \Delta\sigma_{st}$ . Час  $\tau_3$  та  $\tau_4$  визначали за нахилом прямолінійних ділянок залежності провідності від часу в напівлогарифмічному масштабі (рис.3).

Наявність двох експонент свідчить про участь в рекомбінаційних процесах двох типів центрів захоплення (пасток) з різними перерізами, які створюють рівні енергії в забороненій зоні. Таким чином релаксація ФП досліджуваних зразків характеризується «швидкою» та «повільною» складовою.

Таблиця 1. Часові параметри релаксаційних процесів в кристалах  $Ag_2In_2SiSe_6$  і  $Ag_2In_2GeSe_6$

$Ag_2In_2SiSe_6$					$Ag_2In_2GeSe_6$				
T, K	$\tau_1$ , c	$\tau_2$ , c	$\tau_3$ , c	$\tau_4$ , c	T, K	$\tau_1$ , c	$\tau_2$ , c	$\tau_3$ , c	$\tau_4$ , c
100	3,5	7	1,6	6	100	1,3	3,3	1	4
180	2	4	1,2	4	140	0,5	0,7	0,3	3
220	0,5	1,3	0,4	3	220	0,2	0,3	0,2	0,9
300	0,3	0,5	0,2	1	300	0,1	0,2	0,07	0,4

**Висновки.** В кристалах  $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$  і  $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{GeSe}_6$  має місце довготривала релаксація. Проаналізовано релаксаційні криві, на основі яких отримано час наростання та час спаду ФП. Релаксаційні процеси зумовлені переходами електронів на дефектні центри.

**Робота виконана за підтримки Міністерства освіти та науки України (Договір М/106-2014 від 23.06.2014 року).**

**Список літератури:**

1. Electrodeposition of  $\text{AgInSe}_2$  films from a sulphate bath / Ueno Y. [et al.] // *Thin Solid Films*. – 1990. – V. 189. – №. 1. – P. 91-101.
2. Lerner L. S.  $\text{CuGaSe}_2$  and  $\text{AgInSe}_2$ : Preparation and properties of single crystals / Lerner L. S. // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 1966. – V. 27. – №. 1. – P. 1-8.
3. Koughia K.V. In: *Advances in Disordered Semiconductors: Transport, Correlation and Structural Defects* / K.V. Koughia, I.S. Shlimak // ed. by H. Fritzsche World Scientific Publishing Company – 1990. – V. 3. – P. 213.
4. Lekse J. W. Understanding solid-state microwave synthesis using the diamond-like semiconductor,  $\text{AgInSe}_2$ , as a case study / Lekse J. W., Pischera A. M., Aitken J. A. // *Materials research bulletin*. – 2007. – V. 42. – №. 3. – P. 395-403.
5. Synthesis and characterization of  $\text{AgInSe}_2$  for application in thin film solar cells / Mustafa H. et al. // *Thin solid films*. – 2007. – V. 515. – №. 17. – P. 7001–7004.
6. Рывкин С. М. Фотоэлектрические явления в полупроводниках / С. М. Рывкин. – М.: Физматгиз, 1963. – 496 с.

УДК 539.261

## **СИНТЕЗ ТА РЕНТГЕНОСТРУКТУРНІ ДОСЛІДЖЕННЯ НАНОЧАСТИНОК ГІДРОКСИДУ КАДМІЮ**

### **Капітула С. Ю.**

магістрант спеціальності «Фізика» Рівненського державного гуманітарного університету,  
e-mail: kapitulaserhiy@gmail.com

Зменшення розмірів структурних елементів (частинок, кристалітів) нижче певного порогу приводить до значної зміни фізико-хімічних властивостей порівняно з об'ємним зразком такого самого хімічного складу. Зокрема при переході до нанорозмірних частинок відбуваються суттєві зміни електричних, магнітних, оптичних, каталітичних та інших властивостей. Ці властивості роблять їх перспективними матеріалами для використання в мікроелектроніці, оптоелектроніці нелінійній оптиці та в інших галузях [1].

Гідроксид кадмію ( $\text{Cd}(\text{OH})_2$ ) належить до широкозонних напівпровідникових матеріалів з шириною забороненої зони 4,45 еВ за кімнатної температури і може бути використаний в різноманітних фотоелектронних пристроях, зокрема для виготовлення вікон сонячних елементів, фотодіодів та фототранзисторів, прозорих електродів та сенсорів. Він використовується як електродний матеріал в джерелах постійного струму і матеріал для отримання оксиду кадмію [2].



Метою даної роботи є дослідження особливостей отримання гідроксиду кадмію електролітичним методом.

Наноструктуровані сполуки кадмію було отримано електролітичним методом. В якості електроліту використовувався розчин кухонної солі в дистильованій воді з концентрацією 500 мг/л. Процес електролізу проводився за температури (98 °С). Тривалість експерименту складала 2 год., при густині струму  $2,75 \cdot 10^{-2}$  А/см<sup>2</sup>. Живлення електролізера здійснювалося від регульованого стабілізованого джерела постійного струму. Для рівномірного використання кадмієвих електродів здійснювали реверс напрямку постійного струму. Час реверсу складав 0,5 год.

Після закінчення електролізу електроліт, фільтрували за допомогою паперового фільтру і отриманий порошок промивали п'ятикратним об'ємом дистильованої води. Зразки висушували на повітрі при кімнатній температурі. Рентгенівські дослідження проводилися на рентгенівському дифрактометрі ДРОН – 4 з використанням  $\text{CuK}_\alpha$  випромінювання за кімнатної температури.

На рис. 1 показано рентгенівську дифрактограму порошку, отриманого з часом реверсування напрямку постійного струму 30 хвилин. Для її аналізу проводили її порівняння з дифрактограмами таких речовин: гексагональної модифікації  $\beta\text{-Cd}(\text{OH})_2$ , моноклінної модифікації  $\gamma\text{-Cd}(\text{OH})_2$  і карбонату кадмію  $\text{CdCO}_3$ . Порівняння теоретичних та експериментальних результатів показали, що в наших умовах утворюється суміш порошків: гексагональної і моноклінної модифікації  $\text{Cd}(\text{OH})_2$ , а також кадмій карбонату.

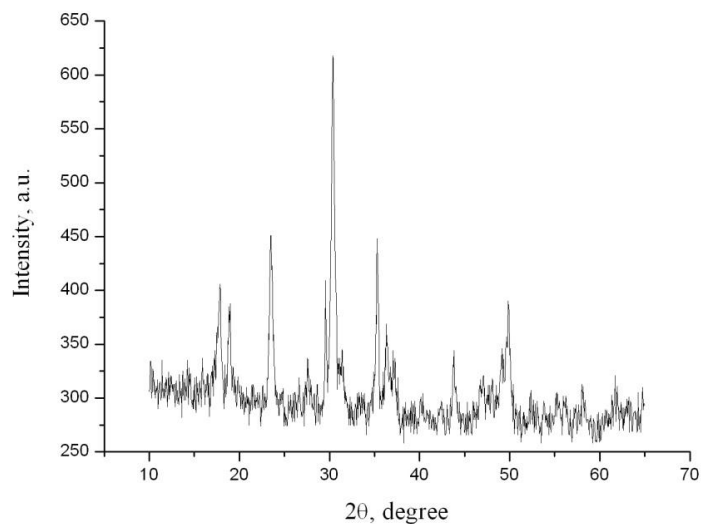


Рис. 1. Дифрактограма порошку сполук кадмію, отриманого протягом 4 год.

Для проведення кількісного аналізу отриманого наноструктурованого порошку був використаний рентгенофазовий аналіз. Відомо, що інтегральна інтенсивність дифракційних максимумів при використанні дифрактометра з плоским зразком описується рівнянням [3]:

$$I = I_0 \left( \frac{e^4 \lambda^3}{32 \pi m^2 c^4 R} \right) (N^2 / 2\mu) \text{PLG} \rho |F|^2,$$

де  $I_0$  – інтенсивність падаючого рентгенівського випромінювання,

$N$  – число елементарних комірок в одиниці об'єму,

$\mu$  – лінійний коефіцієнт поглинання,

$PLG$  – кутовий множник,

$p$  – фактор повторюваності,

$|F|$  - модуль структурної амплітуди.

В випадку суміші речовин інтегральна інтенсивність пропорційна об'ємному вмісту компонент. В дифрактометрі фокусування рентгенівських променів відбитих від плоскої пластинки робить поглинання незалежним від кута  $\theta$ , бо воно послаблює інтенсивність всіх дифрагованих пучків в однакове число разів і не впливає на відносні інтенсивності [3].

В випадку суміші, яка складається з трьох компонент необхідно буде розв'язувати систему трьох рівнянь з трьома невідомими:

$$c_1/c_2 = (I_1 N_2^2 PLG_2 p_2 |F_2|^2)/(I_2 N_1^2 PLG_1 p_1 |F_1|^2)$$

$$c_1/c_3 = (I_1 N_3^2 PLG_3 p_3 |F_3|^2)/(I_3 N_1^2 PLG_1 p_1 |F_1|^2)$$

$$c_1 + c_2 + c_3 = 1$$

В таблиці 1 наведені дані таких речовин: гідроксид кадмію (гексагональна модифікація), гідроксид кадмію (моноклінна модифікація) і карбонат кадмію. Для визначення об'ємного вмісту компонентів були використані рефлекси (001) ( $\beta$ -Cd(OH)<sub>2</sub>  $2\theta = 18,9^\circ$ ), (020) ( $\gamma$ -Cd(OH)<sub>2</sub>  $2\theta = 18,0^\circ$ ), (012) (CdCO<sub>3</sub>  $2\theta = 23,5^\circ$ ), і з дифрактограми були визначені їх інтегральні інтенсивності. Крім того були проведені розрахунки таких величин  $PLG$  – кутовий множник ( $PLG = (1 + \cos^2 2\theta)/\sin^2 \theta \cos \theta$ ),  $|F|$  - модуль структурної амплітуди.

Таблиця 1. Фізичні властивості сполук кадмію

Речовина	Просторова група	Параметри елементарної комірки, нм	Густина, $10^3$ кг/м <sup>3</sup>	Об'єм елементарної комірки, нм <sup>3</sup>	Число елементарних комірок в одиниці об'єму, $10^{27}$ м <sup>-3</sup>
$\beta$ -Cd(OH) <sub>2</sub>	$R\bar{3}m1$	a = 0,3487 c = 0,4679	4,79	0,0450316	22,206612
$\gamma$ -Cd(OH) <sub>2</sub>	Im	a = 0,5642 b = 1,02233 c = 0,34042 $\alpha = 90^\circ$ $\beta = 91,523^\circ$ $\gamma = 90^\circ$	4,88	0,19628441	5,094648
CdCO <sub>3</sub>	$R\bar{3}c$	a = 0,6124 $\alpha = 47,4^\circ$	4,96	0,056442306	17,71720657

Таблиця 2. Результати попередніх розрахунків

Рефлекс	Інтегральна інтенсивність, I	$N \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$	$\rho$	PLG	$ F ^2$
(001) $\beta$ -Cd(OH) <sub>2</sub>	51	22,21	2	71,27	1877,49
(020) $\gamma$ -Cd(OH) <sub>2</sub>	69	5,09	2	78,75	2723,19
(012) CdCO <sub>3</sub>	108	17,72	6	45,34	732,13

Використовуючи дані про фізичні властивості речовин і попередні розрахунки наведені в табл.1 і 2 і розв'язавши вище вказану систему рівнянь ми отримали:  $c_1 = 13,9\%$ ,  $c_2 = 36,5\%$ ,  $c_3 = 49,6\%$ , де:  $c_1$  – об'ємний вміст  $\beta$ -Cd(OH)<sub>2</sub>;  $c_2$  – об'ємний вміст  $\gamma$ -Cd(OH)<sub>2</sub>;  $c_3$  – об'ємний вміст CdCO<sub>3</sub>. Легко показати, що масові відсотки складають відповідно 13,6%, 36,3%, 50,1%.

**Список літератури:**

- 1.Ворох А.С., Гетеронаоструктура Cd(OH)<sub>2</sub>/CdS типа ядро-оболочка. Доклады Академии наук, 2008, Т. 419, №1, С. 58-64.
- 2.Zhang D.E., Pan X.D., Zhu H., Li S.Z., Xu G.Y., Zhang X.B., Ying A.L., Tong Z.W. A simple method to synthesize cadmium hydroxide nanobelts.Nanoscale Res.Lett. №3, 2008, С. 284-288.
- 3.Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм М.: Мир, 1972, 384

УДК 621. 315. 592

## ДОСЛІДЖЕННЯ П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНИХ МОДУЛІВ МОНОКРИСТАЛІВ

### $\text{Ag}_x\text{Ga}_x\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_2$ ( $0,167 > x > 0,333$ )

**Кримусь А. С.<sup>1</sup>, Нігматуліна О. С.<sup>2</sup>, Прокопюк Л. Л.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>аспірант Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,  
e-mail: krymusas@rambler.ru,

<sup>2</sup>студентка III курсу Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

<sup>3</sup>студент IV курсу Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки

Значні успіхи, досягнуті у розвитку фізики твердого тіла, а також багатьох галузей техніки, в значній мірі обумовлені створенням нових речовин з наперед прогнозованими властивостями [1 – 3]. Спектр речовин для цих потреб, окрім традиційних кремнію, германію, суттєво урізноманітнюється за рахунок складних тетрарних сполук, що містять у своєму складі халькогени (S, Se).

Велика анізотропія та широкі області пропускання світла, а також значна поляризація атомів халькогенів, робить ці речовини перспективними в багатьох областях напівпровідникової техніки

з використанням нелінійних, п'єзоелектричних, електрооптичних і електричних характеристик матеріалу.

Монокристали  $Ag_xGa_xGe_{1-x}Se_2$  є низько симетричними кристалами, які можуть бути перспективними матеріалами електронної і оптоелектронної техніки, і можуть бути керовані лазерним світлом [4].

Метою даної роботи є дослідження п'єзоелектричних тензорних коефіцієнтів монокристалів  $AgGaGe_3Se_8$ ,  $AgGaGe_4Se_{10}$ ,  $AgGaGe_5Se_{12}$  без та з лазерною підсвіткою.

Для експериментальних досліджень виготовлялись зразки у формі паралелепіпедів розмірами  $5 \times 4 \times 2$  мм. Обробку поверхні зразків проводили методом механічної шліфовки з використанням алмазних паст різної зернистості.

Обрахунок п'єзоелектричних модулів проводиться за формулою:

$$d_{ef} = k \frac{U_1 U_2}{U_1 - U_2},$$

де  $U_1$  – значення напруги без конденсатора;

$U_2$  – значення напруги з конденсатором.

Всі вимірювання виконані з використанням однієї і тієї ж механічної сили, що діє на зразок під час досліджень. Тут  $k = \frac{C_0}{F}$  – константа, яка є характеристикою вимірювальної установки. Для визначення  $k$  ми використовували монокристалічний зразок кристалу  $LiNbO_3$ . Визначена константа  $k$  для  $LiNbO_3$  дорівнювала  $2,67 \times 10^{-11}$  м/В<sup>2</sup>.

Значення п'єзоелектричних модулів трьох основних компонент тензора представлено в таблиці 1.

Таблиця 1. Значення п'єзоелектричних модулів трьох основних компонент тензора для монокристалів  $Ag_xGa_xGe_{1-x}Se_2$  ( $0,167 > x > 0,333$ )

	$d_{11}$ , м/В	$d_{22}$ , м/В	$d_{33}$ , м/В
$AgGaGe_3Se_8$	1,08E-12	2,39E-12	5,14E-12
$AgGaGe_4Se_{10}$	0,94E-12	1,49E-12	4,65E-12
$AgGaGe_5Se_{12}$	0,79E-12	1,30E-12	2,70E-12

З таблиці видно істотну анізотропію трьох діагональних компонент тензорів, яка відображає високою анізотропію досліджуваних кристалів.

**Робота виконана за підтримки Міністерства освіти та науки України (Договір М/106 – 2014 від 23.06.2014).**

**Список літератури:**

1. Two-photon absorption of  $Tl_{1-x}In_xSn_xSe_2$  ( $x = 0, 0.1, 0.2, 0.25$ ) single crystalline alloys and their nanocrystallites / [G. E. Davydyuk, M. Piasecki and o.] // Optical Materials. – 2013. – V. 35 – P. 2514 – 2518.

2. Single crystal growth and the electronic structure of orthorhombic  $\text{Tl}_3\text{PbBr}_5$ : A novel material for non-linear optics / [O. Y. Khyzhun, V. L. Bekenev and o.] // Optical Materials – 2013. – V. 35 – P. 1081–1089.

3. Single crystal growth and the electronic structure of  $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$  / [O. Y. Khyzhun, V. L. Bekenev and o.] // Optical Materials – 2013. – V. 36. – P. 251 – 258.

4. Laser-induced piezoelectric effects in chalcogenide crystals / [I. V. Kityk, N. AlZayed and o.] // Physica B. – 2013. – V. 423. – P. 60 – 63.

УДК 546.683.3'817'141

## ВЗАЄМОДІЯ МІЖ ТАЛІЙ (I) ТА ПЛЮМБУМ (II) БРОМІДАМИ

**Левковець С. І.<sup>1</sup>, Андріяшина І. С.<sup>2</sup>, Піскач Л. В.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>аспірант Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

e-mail: ya.hhhggg@yandex.ua,

<sup>2</sup>аспірант Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

<sup>3</sup>кандидат хімічних наук, доцент кафедри неорганічної та фізичної хімії

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки

Зростаючий інтерес, який спостерігається останнім часом до бромідних сполук як в кристалічному, так і в склоподібному станах, зумовлений можливістю їх використання в ІЧ-оптиці, так як вони прозорі в дальній частині спектра ІЧ-області (більше 20 мкм) [1].

Метою роботи є уточнення фазових взаємодій в системі  $\text{TlBr} - \text{PbBr}_2$ .

Згідно [2] в системі  $\text{TlBr} - \text{PbBr}_2$  утворюються три сполуки з складами 33,333, 50 і 75 мол. %  $\text{TlBr}$ .  $\text{TlPbBr}_3$  утворюється інконгруентно за реакцією  $L_p + \text{TlPb}_2\text{Br}_5$  при 641 К.  $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$  і  $\text{Tl}_3\text{PbBr}_5$  утворюються конгруентно при 668 К та 665 К відповідно. В системі протікають три евтектичні процеси при 622, 630 та 657 К.

$\text{Tl}_3\text{PbBr}_5$  кристалізується в орторомбічній [3] або тетрагональній [4] сингонії, просторова група  $P2_12_12_1$  [3] або  $P4_1$  [4],  $Z=4$ , з параметрами елементарної комірки  $a=1,5399$ ,  $b=0,9063$ ,  $c=0,8532$  нм [3] або  $a=0,8903$ ,  $c=1,5486$  нм [4];  $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$  – в моноклінній сингонії, просторова група  $P2_1/c$ ,  $Z=4$ , параметри елементарної комірки становлять  $a=0,9304(4)$ ,  $b=0,8336$ ,  $c=1,3004(5)$  нм [5, 6] або  $a=0,92957(7)$ ,  $b=0,83407(7)$ ,  $c=1,30131(1)$  нм,  $\beta=89,96(1)^\circ$  [7], структурний тип  $\text{NH}_4\text{Pb}_2\text{Cl}_5$  [5–7].

Для дослідження системи  $\text{TlBr} - \text{PbBr}_2$  синтезували 11 зразків в повному концентраційному інтервалі. Вихідними матеріалами для приготування сплавів слугували попередньо отримані та очищені зонною перекристалізацією бінарні броміди. Зразки синтезували безпосереднім сплавленням у відкачаних до  $1,33 \cdot 10^{-2}$  Па і запаяних кварцових ампулах. Максимальна

температура синтезу становила 873 K. Після 6 год витримки, температуру поступово понижували (~20 K/год) до кімнатної температури.

Отримані сплави досліджували рентгенофазовим та диференційно-термічним методами аналізу. РФА проводився методом порошку на дифрактометрі ДРОН-4-13 (CuK $\alpha$ - випромінювання). Запис кривих ДТА проводився на дериватографі системи Paulik-Paulik-Erdey з використанням Pt/Pt-Rh термопари.

Дифрактограми синтезованих зразків системи TlBr – PbBr<sub>2</sub> (300 K) представлені на рис. 1. В системі підтверджено існування двох сполук TlPb<sub>2</sub>Br<sub>5</sub> і Tl<sub>3</sub>PbBr<sub>5</sub>. TlPb<sub>2</sub>Br<sub>5</sub> проіндексована в моноклінній сингонії, просторова група  $P2_1/c$  з параметрами елементарної комірки  $a=0,92938$ ,  $b=0,83387$ ,  $c=1,30105$  нм,  $\beta=89,8893^\circ$ ; Tl<sub>3</sub>PbBr<sub>5</sub> – в орторомбічній сингонії, просторова група  $P2_12_12_1$  з параметрами елементарної комірки  $a=1,53815$ ,  $b=0,90582$ ,  $c=0,85274$  нм.

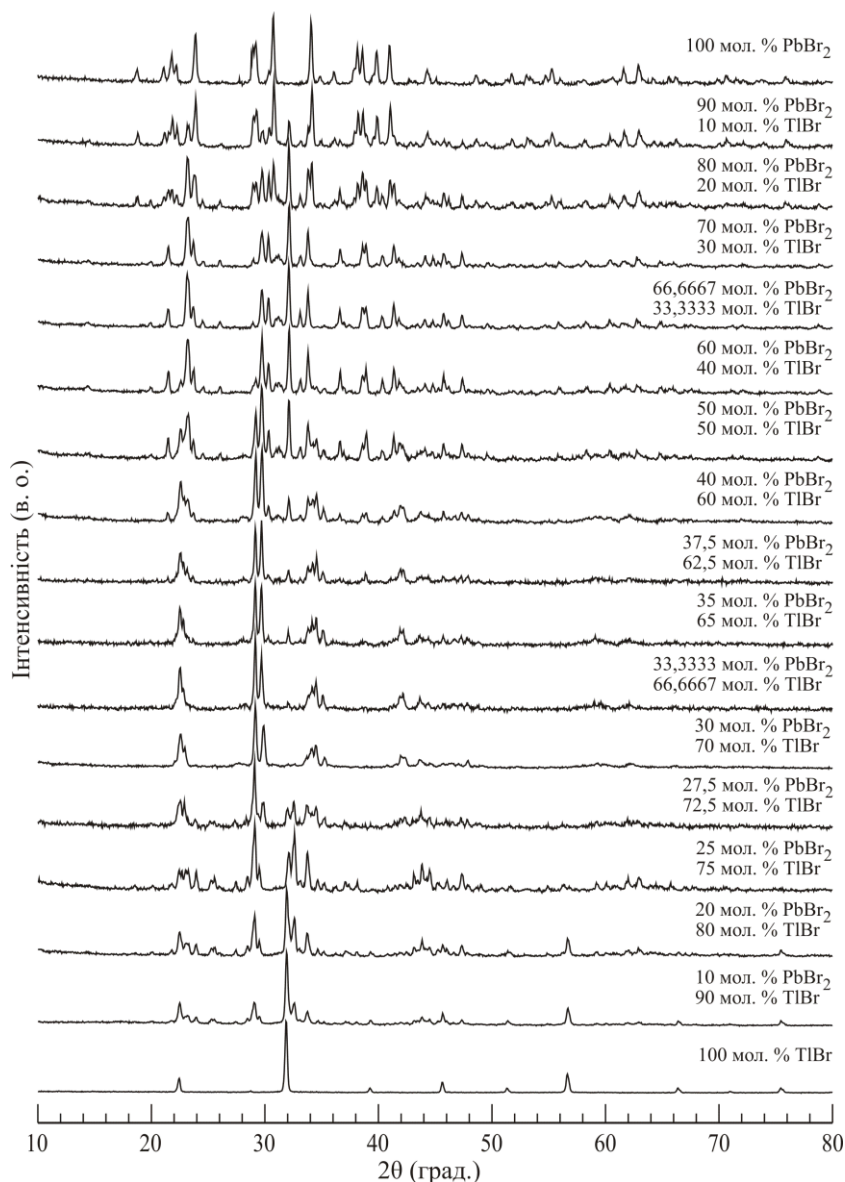


Рис. 1. Дифрактограми синтезованих зразків системи TlBr – PbBr<sub>2</sub>

Порівнюючи дифрактограми зразків системи можна стверджувати, що утворюється фаза складу Tl<sub>2</sub>PbBr<sub>4</sub> (66,667 мол. % TlBr). А сплав складу “TlPbBr<sub>3</sub>” є сумішшю TlPb<sub>2</sub>Br<sub>5</sub> та Tl<sub>2</sub>PbBr<sub>4</sub>.

Параметри елементарної комірки сплаву “ $\text{TlPbBr}_3$ ” за  $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$  становлять  $a=0,92853$ ,  $b=0,83011$ ,  $c=1,29434$  нм,  $\beta=89,7505^\circ$ .

Із аналізу кривих нагрівання і охолодження згідно даних ДТА слідує, що сполуки  $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$  і  $\text{Tl}_3\text{PbBr}_5$  утворюються конгруентно при температурі при 643 та 646 К відповідно,  $\text{Tl}_2\text{PbBr}_4$  – інконгруентно за реакцією  $L_p + \text{Tl}_3\text{PbBr}_5$  при 625 К. Поліморфні перетворення для  $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$  та  $\text{Tl}_3\text{PbBr}_5$  виявлені за температури 591 К та 497 К відповідно. Три евтектичні процеси протікають при 590, 604 та 638 К.

**Список літератури:**

1. Kadono K. Glass formation in the system  $\text{ZnBr}_2\text{-KBr-MBr}_2$  / K. Kadono, M. Nogami // Journal of Non-Crystalline Solids. – 1988. – V. 95–96. – Pt. 1. – P. 473–478.
2. Binary systems formed by Lead Bromide with (Li, Na, K, Cs and Tl)Br : a DTA and diffractometric study / M. Cola, V. Masarotti, R. Riccardi, C. Sinistri // Zeitschrift für Naturforsch. – 1971. – № 26. – P. 1328.
3. Keller H. L. Tief- $\text{Tl}_3\text{PbBr}_5$ , Darstellung und Kristallstruktur / H. L. Keller // Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie. – 1981. – V. 482. – P. 154–162.
4. Keller H. L. Darstellung und Kristallstruktur von hoch- $\text{Tl}_3\text{PbBr}_5$  / H. L. Keller // Journal of the Less-Common Metals. – 1981. – V. 78. – P. 281–286.
5. Beck H. P. A Study on  $\text{AB}_2\text{X}_5$  Compounds (A: K, In, Tl; B: Sr, Sn, Pb; X: Cl, Br, I) / H. P. Beck, G. Clicque, H. Nau // Z. Anorg. Allg. Chem. – 1986. – V. 536. – № 5. – P. 35–44.
6. Ras F. G. Ammonium dilead chloride / F. G. Ras, D. J. W. IJdo, G. C. Verschoor // Acta Crystallographica B. – 1977. – V. 33. – № 1. – P. 259–260.
7. Khyzhun O.Y. Single crystal growth and the electronic structure of  $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$  / O.Y. Khyzhun, V.L. Bekenev, N.M. Denysyuk et al. // Optical Materials. – 2013. – V. 36. – № 2. – P. 251–258.

УДК 621. 315. 592

## ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$ – $\text{TlPb}_2\text{J}_5$

Маїло С. В.<sup>1</sup>, Денисюк Н. М.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>студент Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail:

www.smail11.com@mail.ru,

<sup>2</sup>аспірант Інститут проблем матеріалознавства НАН України, e-mail: denisyuck.natalia@yandex.ru

Бромід талію становить інтерес, як напівпровідниковий детектор  $\gamma$ -випромінювання. Напівпровідникові детектори забезпечують пряме перетворення  $\gamma$ -випромінювання в електричний сигнал, на відміну від сцинтиляційних детекторів, які вимагають оптичних систем зчитування, таких як ФЕУ або лавинні фотодіоди. Огляд складних напівпровідників для реєстрації  $\gamma$ -випромінювання був зроблений МакГрегором в [1]. В даний час провідними напівпровідниковими

сполуками для портативних  $\gamma$ -спектрометрів є CdTe і  $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$  (CZT). CZT детектори забезпечують високу енергетичну роздільну здатність [2] і стабільну роботу при кімнатній температурі. Тим не менш, незважаючи на десятиліття досліджень, однорідність CdTe і CZT кристалів не є дуже доброю, особливо для великих об'ємів детектора [3]. TlBr має ряд переваг в порівнянні з CZT, що забезпечується більш високою щільністю ( $7,56 \text{ г/см}^3$ ), більш високими атомними номерами і ширина забороненої зони  $E_g = 2,8 \text{ еВ}$  також підходить для роботи при кімнатній температурі. Бромід талію плавиться при більш низькій температурі ( $480^\circ\text{C}$ ) і може бути вирощений з розплаву за допомогою звичайних методів росту об'ємних кристалів.

В роботі [4] досліджувався вплив  $\Gamma$  в кристалі  $\text{TlBr}_x\text{I}_{1-x}$  на ширину забороненої зони. Коли змінюється ширина забороненої зони напівпровідникового детектора слід мати на увазі, що існує залежність між високим струмом витоку і поганим співвідношенням сигнал/шум при високій  $E_g$ . Бромйодид талію змінює свою ширину забороненої зони від 2,15 до 2,8 еВ при зміні  $x$  від 0,3 до 1 [5]. Крім того,  $\text{TlBr}_x\text{I}_{1-x}$  кристали механічно сильніші, ніж TlBr. Що є важливим для мінімізації механічних дефектів при виготовленні пристроїв.

В нашій роботі досліджувались спектри поглинання монокристалів твердих розчинів  $\text{TlPb}_2\text{Br}_5 - \text{TlPb}_2\text{I}_5$  –  $\text{TlPb}_2\text{I}_5$  (рис 1) в діапазоні температур 100 – 300 К.

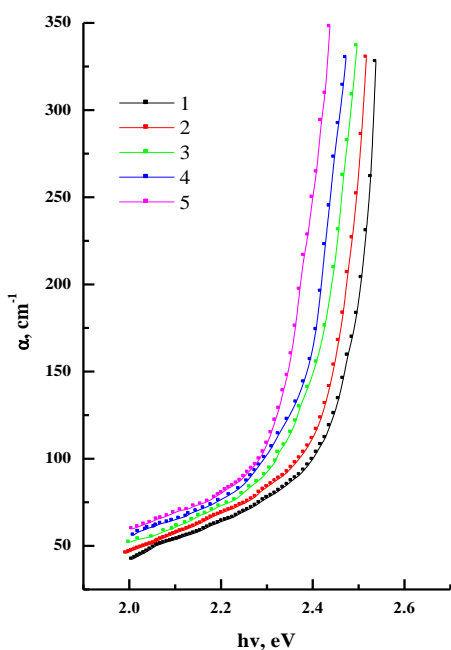


Рис.1. Спектральний розподіл коефіцієнта поглинання монокристалів твердих розчинів  $\text{TlPb}_2\text{Br}_5 - \text{TlPb}_2\text{I}_5$  при  $T = 300 \text{ K}$   
 1 - 20mol% $\text{TlPb}_2\text{Br}_5 - 80\text{mol}\%$  $\text{TlPb}_2\text{I}_5$   
 2 - 30mol% $\text{TlPb}_2\text{Br}_5 - 70\text{mol}\%$  $\text{TlPb}_2\text{I}_5$   
 3 - 40mol% $\text{TlPb}_2\text{Br}_5 - 60\text{mol}\%$  $\text{TlPb}_2\text{I}_5$   
 4 - 50mol% $\text{TlPb}_2\text{Br}_5 - 50\text{mol}\%$  $\text{TlPb}_2\text{I}_5$   
 5 - 60mol% $\text{TlPb}_2\text{Br}_5 - 40\text{mol}\%$  $\text{TlPb}_2\text{I}_5$

За спектрами поглинання при  $K = 350 \text{ см}^{-1}$  оцінена ширина забороненої зони

Таблиця Зміна ширини забороненої зони монокристалів твердих розчинів  $\text{TlPb}_2\text{Br}_5 - \text{TlPb}_2\text{I}_5$

Зразок	20mol% $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$ – 80mol% $\text{TlPb}_2\text{I}_5$	30mol% $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$ – 70mol% $\text{TlPb}_2\text{I}_5$	40mol% $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$ – 60mol% $\text{TlPb}_2\text{I}_5$	50mol% $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$ – 50mol% $\text{TlPb}_2\text{I}_5$	60mol% $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$ – 40mol% $\text{TlPb}_2\text{I}_5$
№	1	2	3	4	5
$T = 100 \text{ K}$	2,67	2,65	2,61	2,59	2,55
$T = 150 \text{ K}$	2,65	2,62	2,59	2,57	2,53
$T = 200 \text{ K}$	2,61	2,59	2,56	2,53	2,50
$T = 250 \text{ K}$	2,59	2,57	2,53	2,50	2,47
$T = 300 \text{ K}$	2,53	2,52	2,50	2,48	2,44



Як видно з отриманих результатів із збільшенням вмісту  $\text{TlPb}_2\text{Br}_5$  збільшується ширина забороненої зони, що узгоджується з результатами [6].

**Список літератури:**

- 1.D.S. McGregor, H. Hermon, Room-temperature compound semiconductor radiation detectors, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 395 (1997) 101–124.
- 2.F. Zhang, Z. He, C. Seifert, A prototype three-dimensional position sensitive CdZnTe detector array, IEEE Transactions on Nuclear Science 54 (4) (2007) 843–848.
- 3.T.E. Schlesinger, R.B. James, Semiconductors for Room Temperature Nuclear Detector Applications, Academic Press, New York, 1995
- 4.Alexei V. Churilov, Guido Ciampi, Hadong Kima, William M. Higgins, Leonard J. Cirignano, Fred Olschner, Viktor Biteman, Mark Minchello, Kanai S. Shah  $\text{TlBr}$  and  $\text{TlBr}_x\text{I}_{1-x}$  crystals for  $\gamma$ -ray detectors, Journal of Crystal Growth 312 (2010) 1221–1227
- 5.K.S. Shah, J.C. Lund, F. Olschner, J. Zhang, L.P. Moy, M.R. Squillante, W.W.Moses, S.E. Derenzo,  $\text{TlBr}_{1-x}\text{I}_x$  photodetectors for scintillation spectroscopy, IEEE Transactions on Nuclear Science 41 (6) (1994) 2715–2718.
- 6.Masaru Ikeda, Masafumi Watari, Fumikazu Tateishi, and Hiromasa Ishiwatari Preparation and characteristics of the  $\text{TlBr-TU}$  fiber for a high power  $\text{CO}_2$  laser beam. Journal of Applied Physics 60, 3035 (1986).

УДК 621. 315. 592

## ФОТОЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ

### $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Se}_2$ ( $x = 0.1; 0.20$ )

Маргарян А.<sup>1</sup>, Аугустас Некрошюс<sup>2</sup>

<sup>1</sup>студент Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: t-300@ukr.net,

<sup>2</sup>студент Вільнюського університету, Литва, e-mail: vaidotas.kazukauskas@ff.vu.lt

Дослідження фотоелектричних властивостей  $\text{TlInSe}_2$  та деяких твердих розчинів на їх основі було проведено в роботах [1-3]. Нами досліджувались тверді розчини  $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Se}_2$  ( $x = 0.1; 0.20$ ), а саме вплив часткового катіонного заміщення іонів  $\text{In}$  іонами  $\text{Ge}$  на фотоелектричні властивості. Розглянуто закономірності зміни цих властивостей від температури і складу.

Монокристали твердого розчину  $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Se}_2$  є фоточутливими матеріалами. Кратність фотовідклику до інтегрального світла освітленістю  $L=10^4$  Лк ( $\sigma_c / \sigma_T$ , де  $\sigma_c$  - провідність при освітленні,  $\sigma_T$  - провідність в темноті) представлена в таблиці 1.

Таблиця 1. Кратність фотовідклику твердого розчину  $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Se}_2$  при  $T = 300$  К

Зразок	x=0.10	x=0.20
$\sigma_c / \sigma_T$	1.1	1.3

Спектральні характеристики фотопровідності (ФП) монокристалів  $Tl_{1-x}In_1-xGe_xSe_2$  ( $x=0.1 - 0.2$ ) при  $T = 100$  К наведені на рис.1.

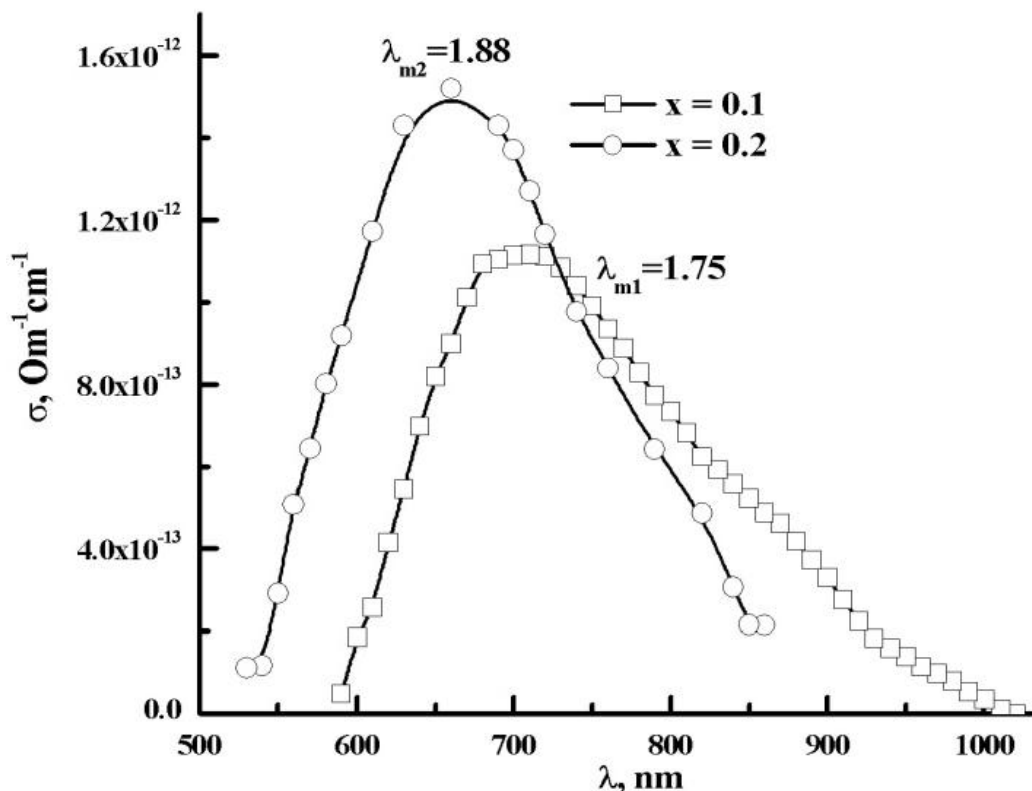


Рис.1. Спектральний розподіл фотопровідності кристалів твердого розчину  $Tl_{1-x}In_1-xGe_xSe_2$  при  $T=100$  К

Встановлено, що при температурі 100 К широкі максимуми ФП знаходяться в області фундаментальних переходів і очевидно є максимумами власної фотопровідності, що узгоджується з даними роботи [4].

Таблиця 2. Положення максимумів власної фотопровідності ( $E_M$ ) і ширина забороненої зони ( $E_g$ ), встановлена зі спектрів поглинання світла в області фундаментальних переходів твердого розчину  $Tl_{1-x}In_1-xGe_xSe_2$

Зразок	$x=0.10$	$x=0.20$
$E_M$ , eV	1.75	1.88
$E_g$ , eV	1.72	1.88

Зміна положення максимуму спектра фотопровідності із зміною  $x$  від  $\lambda_m=710$  нм (при  $x = 0.1$ ) до  $\lambda_m=660$  нм (при  $x = 0.2$ ) обумовлено зміною ширини забороненої зони, що узгоджується з оптичними дослідженнями  $E_g$  методом поглинання світла в області КП (табл.1 [4]).

Проведено дослідження спектрального розподілу фотоструму в діапазоні довжин хвиль 400 – 1100 нм при різних значеннях температури (Рис.2 a,b)

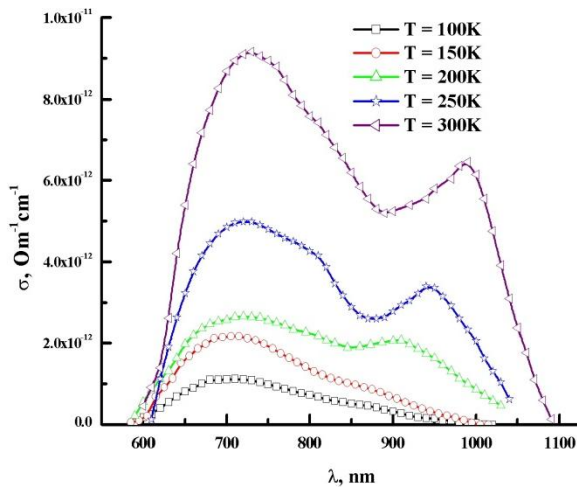


Рис.2а Спектральний розподіл фотопровідності кристалу 90 mol % TlInSe<sub>2</sub> – 10 mol % SnSe<sub>2</sub>

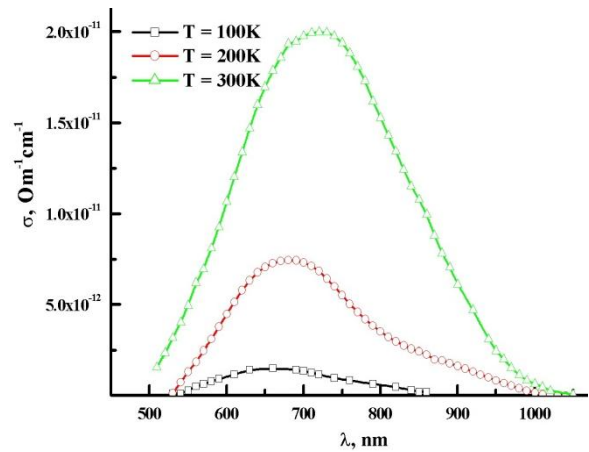


Рис.2в Спектральний розподіл фотопровідності кристалу 80 mol % TlInSe<sub>2</sub> – 20 mol % SnSe<sub>2</sub>

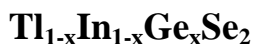
Пояснити однозначно зростання фото чутливості твердого розчину при збільшенні  $x$ , на основі одержаних нами експериментальних даних проблематично. Можна лише припустити, що із збільшенням  $E_g$  відбувається перерозподіл рекомбінаційного потоку дірок із  $S$  - центрів швидкої рекомбінації на  $r$  - центри повільної рекомбінації. Роль  $S$  - центрів, як правило виконують різні структурні дефекти [5],  $r$  - центрів, катіонні вакансії ( $V_{Tl}$ ). Із зростанням  $E_g$  розчину може змінюватись відстань між рівнем Фермі і рівнями  $r$  - і  $S$  - центрів, що впливатиме на їх заповнення носіями і, відповідно, на рекомбінаційні потоки через ці центри.

Як видно із рисунків, із збільшенням температури фотопровідність у всіх досліджуваних зразках твердого розчину збільшується, тобто спостерігається термічна активація фотопровідності. Крім того, фотопровідність твердого розчину в максимумі спектрального розподілу (в нашому випадку власна фотопровідність), також збільшує свою величину із зростанням  $x$  (ширини забороненої зони). Ми вважаємо, що розглядувані вище явища зв'язані з перезарядкою фотоактивних центрів в процесі освітлення і нагрівання зразків.

#### Список літератури:

1. A M Badr and I M Ashraf / Spectral photoelectronic features of TlInSe<sub>2</sub> single crystals // Phys. Scr. 86 (2012) 035704
2. Э.М.Годжаев, Г.С.Джафарова / Фотоэлектрические свойства монокристаллов TlIn<sub>1-x</sub>Pr<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> (0≤x≤0.04) // Неорганические материалы. 2009, Т.45, №11. С.1317 – 1319.
3. Э.М.Керимова, Н.З.Гасанов, Л.А.Исмаилзаде, А.И.Гасанов, С.Ф.Байрамов, С.С.Абдинбеков, П.Г.Исмаилова / Фотоэлектрические и оптические свойства монокристаллов твердых растворов (TiGaS<sub>2</sub>)<sub>1-x</sub>(TlInSe<sub>2</sub>)<sub>x</sub> // Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2009 №5 с.137-142
4. O.V. Zamurueva, G.L. Myronchuk, G. Lakshminarayana, O.V. Parasyuk, L.V. Piskach, A.O. Fedorchuk, N.S. AlZayed, A.M. El-Naggar, I.V. Kityk / Structural and optical features of novel Tl<sub>1-x</sub>In<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> chalcogenide crystals // Optical Materials 37 (2014) 614–620
5. Лашкарев В. Е., Любченко А.В., Шейнкман М.К. / Неравновесные процессы в фотопроводниках. // К.:Наукова думка, 1981. – 263 с.

## ДОСЛІДЖЕННЯ ОПТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МОНОКРИСТАЛІВ



Махновець Г. В.<sup>1</sup>, Рижук А. О.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>аспірантка Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: anjutka\_mv@mail.ru,

<sup>2</sup>студентка III курсу Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки

Монокристали  $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Se}_2$  є новим напівпровідниковим матеріалом з шаруватою кристалічною структурою. Ці кристали перспективні для створення на їх основі детекторів і приймачів випромінювання, а також функціональних пристроїв, керованих електричним полем, що працюють в умовах жорсткої радіації. Збільшений за останні роки інтерес дослідників до твердих розчинів на основі монокристалів  $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Se}_2$  обумовлений сильною анізотропією їх фізичних властивостей. Ці кристали прозорі в широкому спектральному діапазоні; мають слабку чутливість електричних властивостей до введених домішок, а також високу фотопровідність [3]. Все це робить дані матеріали особливо цікавими, як з точки зору з'ясування фундаментальних особливостей кристалічної будови шаруватих напівпровідників, так і з точки зору технічного застосування.

Ось чому збільшення класу саме шаруватих напівпровідників, отримання досконалих монокристалів і подальше вивчення комплексу їх фізичних властивостей – актуальні завдання в галузі сучасної фізики твердого тіла.

Метою даного дослідження є вивчення оптичних властивостей напівпровідникового матеріалу  $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Se}_2$ .

Монокристали  $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Se}_2$  були вирощені методом Бріджмена-Стокбаргера [1].

Спектри поглинання монокристалів  $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Se}_2$  використовуються для вивчення енергетичної щільності і міжзонного переходу з'єднання. Коефіцієнт поглинання був отриманий з експериментальних значень абсорбції при різних температурах зразка. Типові спектри отримані при 100, 150, 200, 250 і 300 К для  $\text{Tl}_{1-x}\text{In}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Se}_2$ .

Коефіцієнт поглинання розраховувався з співвідношення [4. с.456]:

$$T = \frac{(1-R)^2 e^{-ad}}{1-R^2 e^{-2ad}} \quad (1)$$

де  $T = I/I_0$  - коефіцієнт пропускання;  $d$  – товщина зразка;  $R$  – коефіцієнт відбивання. Коефіцієнти оптичного поглинання, визначені для всіх температур з використанням значення  $R$  при кімнатній

температурі. Зроблене припущення, що зміна температури від 10 до 320 К призводить до незначної зміни в R [5].

Аналіз оптичних спектрів поглинання в досліджуваних об'єктах виявив три області спектральної залежності коефіцієнта поглинання: - експоненційну область в інтервалі 0 – 100 см<sup>-1</sup> і області непрямих і прямих оптичних переходів вище експоненційної області.

Результати проведеної оцінки при температурах 100 – 300 К представлені в табл.1.

Таблиця 1. Пряма ( $E_{gd}$ ) і непряма ( $E_{gi}$ ) заборонена зона, енергія Урбаха та параметр крутизни монокристалів  $Tl_{1-x}In_xGe_xSe_2$  при різних температурах

Зразки	Темп, К	$E_{gd}$ , eВ	$E_{gi}$ , eВ	Енергія Урбаха, (meВ)	Параметр крутизни
x=0.1	100	1.72	1.67	33	0.261
	150	1.71	1.65	36	0.359
	200	1.70	1.61	39	0.442
	250	1.68	1.58	43	0.501
	300	1.66	1.56	50	0.517
x=0.2	100	1.88	1.69	76	0.113
	150	1.85	1.66	78	0.116
	200	1.82	1.62	79	0.218
	250	1.78	1.59	80	0.269
	300	1.77	1.58	82	0.315

Як слідує із табл.1 із збільшенням вмісту  $GeSe_2$  в твердому розчині зростає ширина енергетичної щілини як при непрямих так і при прямих дозволених переходах. Таке зростання  $E_g$  можна пов'язати із механізмом утворення твердого розчину, згідно з яким відбувається статистичне заміщення атомів In атомами Ge та збільшення концентрацій вакансій талію  $V_{Tl}$ . Внаслідок статистичного заміщення атомів In ( $In^{+3}$ ) атомами Ge ( $Ge^{+4}$ ) утворюються донорні центри, концентрація яких збільшується із збільшенням x. Утворення позитивно заряджених іонів (донорів) та негативно заряджених іонів ( $V_{Tl}$  - акцепторів) веде до зростання іонного зв'язку між ними. Збільшення енергії зв'язку між атомами кристалу веде до зростання  $E_g$ . Крім того, додатковий внесок в зміну  $E_g$  можуть робити вакансії кристалографічної ґратки, які створюють деформаційний потенціал, що відповідає розтягу ґратки [4, с.456]. Більшість експериментальних результатів різних авторів свідчить, що зменшення параметрів кристалічної ґратки веде до зростання  $E_g$ , це добре проявляється в експериментах по гідростатичному стиску кристалів [4, с.456].

Із збільшенням температури ширина енергетичної щілини досліджуваних сполук як при прямих так і при непрямих дозволених переходах зменшується (табл. 1.), що може бути зумовлено: а) взаємним відштовхуванням рівнів в зонах при збільшенні електрон-фононної взаємодії; б) тепловим розширенням решітки (ангармонізм коливань) і відповідною залежністю

енергетичної щільності від сталої решітки; в) згладжуванням періодичного потенціалу, що описується фактором Дебая-Уоллера; г) взаємодією міжзонних станів [5, 6].

Розраховані температурні коефіцієнти зміни ширини забороненої зони при прямих ( $dE_{gd} / dT$ ) і непрямих ( $dE_{gi} / dT$ ) дозволених переходах (табл. 1). Як видно, всі температурні коефіцієнти мають від'ємні знаки, що дозволяє припустити, що внесок електрон-фононої взаємодії при збільшенні температури більший ніж внесок від теплового розширення решітки. Ширина забороненої зони для непрямих оптичних переходів в монокристалах  $Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$  ( $x=0.1; 0.2$ ) менша, ніж для прямих оптичних переходів. Ця зміна є типовою для кристалів що мають шарувату структуру [6, с.93].

**Робота виконана за підтримки Міністерства освіти та науки України (Договір М/106 – 2014 від 23.06.2014).**

**Список літератури:**

1. M. Yu. Mozolyuk, L. V. Piskach, A. O. Fedorchuk, I. V. Kityk, I. D. Olekseyuk, O. V. Parasyuk Journal of Alloys and Compounds 509 (2011) 2693
2. F. Urbach, Phys. Rev. 92 (1953) 1324
3. G. Myronchuk, S. Danylchuk, O. V. Parasyuk, L. V. Piskach, and A. O. Fedorchuk Cryst. Res. Technol., 1–12 (2013) /DOI 10.1002/crat.201300126]
4. G. L. Myronchuk G. E. Davydyuk O. V. Parasyuk O. Y. Khyzhun R. A. Andrievski A. O. Fedorchuk S. P. Danylchuk L. V. Piskach M. Y. Mozolyuk / J Mater Sci: Mater Electron DOI 10.1007/s10854-013-1285-0
5. I. V. Kityk, J. Eboth'e, A. El Hichou, B. El Idrissi, and M. Addou, Journ. of Optics A: Pure and Applied Optics, 5, 61(2003).
6. B. Gurbulak, S. Duman, A. Ates Czechoslovak Journal of Physics Vol. 55 (2005) 93.

УДК 621.315.592

## **ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ $Ag_xGa_xGe_{1-x}Se_2$**

**Мельник М.<sup>1</sup>, Кримусь А.<sup>2</sup>, Василюк М.<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>студент Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail:mikhailo.m@mail.ru,

<sup>2</sup>аспірант Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,

<sup>3</sup>слухач Волинського обласного відділення Малої академії наук України

Вивчення фізичних властивостей кристалічних сполук в залежності від складу є ефективним засобом для визначення кореляції між структурою і властивостями матеріалу. В нашій роботі досліджувались оптичні властивості монокристалів  $Ag_xGa_xGe_{1-x}Se_2$

Важливою характеристикою, яка визначає комплекс оптичних властивостей напівпровідникових матеріалів, є положення і форма краю фундаментального поглинання (ФП), які залежать від умов зовнішнього впливу (температури, механічного навантаження, радіаційного

опромінення). Разом з тим, вивчення поглинання світла в напівпровідниках є потужними методом дослідження їх дефектного стану.

За експериментальними даними ( $I_0$ ,  $I$ ,  $R$ ) побудовано енергетичну залежність коефіцієнта поглинання досліджуваних кристалів в діапазоні температур 100 – 300 К. За значенням енергії кванта світла на краю смуги власного поглинання (для  $\alpha = 150\text{см}^{-1}$ ) оцінена, ширина забороненої зони (Табл).

	T=100 К	T=150 К	T=200 К	T=250 К	T=300 К
AgGaGe <sub>2</sub> Se <sub>6</sub> (x=0.333)	2,33 eВ	2,30 eВ	2,26 eВ	2,21 eВ	2,16 eВ
AgGaGe <sub>3</sub> Se <sub>8</sub> (x=0.25)	2,39 eВ	2,35 eВ	2,30 eВ	2,25 eВ	2,20 eВ
AgGaGe <sub>4</sub> Se <sub>10</sub> (x=0.2)	2,41 eВ	2,36 eВ	2,31 eВ	2,26 eВ	2,20 eВ
AgGaGe <sub>5</sub> Se <sub>12</sub> (x=0.167)	2,43 eВ	2,38 eВ	2,34 eВ	2,29 eВ	2,24 eВ

Температурна залежність зміни ширини забороненої зони при T>100 К сполук різного складу зменшується зменшується із зростанням T, що обумовлює зсув краю поглинання сполук в низькоенергетичну область.

За отриманими даними визначили температурний коефіцієнт зміни ширини забороненої зони, який становить  $\sim(7 \div 9) \cdot 10^{-3} \text{eВ/К}$ .

В області  $h\nu < E_g$  залежність  $\alpha$  від  $h\nu$  описується експоненційною функцією:

$$\alpha = \alpha_0 e^{-\frac{E_{g0} - h\nu}{\Delta_0}};$$

де  $\Delta_0$  - характеристична енергія, яка відповідає за ступінь розупорядкування кристалічної ґратки (енергія Урбаха). А відповідна ділянка кривої називається хвостом Урбаха. Наявність хвоста Урбаха обумовлена високою густиною локалізованих станів в забороненій зоні.

З експериментальних значень визначили  $\Delta_0$ , що представлено в табл.

	T=100 К	T=150 К	T=200 К	T=250 К	T=300 К
AgGaGe <sub>2</sub> Se <sub>6</sub> (x=0.333)	0,033eВ	0,039 eВ	0,044 eВ	0,050 eВ	0,053 eВ
AgGaGe <sub>3</sub> Se <sub>8</sub> (x=0.25)	0,041eВ	0,043 eВ	0,047 eВ	0,053 eВ	0,055 eВ
AgGaGe <sub>4</sub> Se <sub>10</sub> (x=0.2)	0,047 eВ	0,049 eВ	0,051 eВ	0,056 eВ	0,058 eВ
AgGaGe <sub>5</sub> Se <sub>12</sub> (x=0.167)	0,054 eВ	0,056 eВ	0,058 eВ	0,059 eВ	0,06 eВ

Зростання значення  $\Delta_0$  для сполук різного складу при збільшенні температури зразків, очевидно зв'язане з збільшенням неупорядкованості зразків, яка визначається як статичною, так і динамічною складовими. Найбільш досконалими зразками, очевидно, є зразки з x=0,333. Найбільша швидкість зростання  $\Delta_0$  із збільшенням температури засвідчує, що домінуючу роль в порушенні далекого порядку відіграє температурне коливання атомів сполуки, тобто динамічна складова. У випадку домінування статичного безпорядку обумовленого структурними дефектами

$\Delta_0 \approx \text{const}$ . Із зменшенням значення  $x$  зростає  $\Delta_0$ , що можна пояснити збільшенням вкладу статичного безпорядку, зв'язаного із зростанням концентрації структурних дефектів і зменшенням ролі динамічного безладу.

**Список літератури:**

1. Мотт Н. Електронные процессы в некристаллических веществах / Н. Мотт, Е. Девис; [пер. с англ. Б.Т. Коломойца]. – М.: Мир, 1974. – 472с.
2. Стилбанс Л.С. Физика полупроводников / Л.С. Стилбанс. – М.: Сов. радио, 1967. – 452с.
3. Давидюк Г.Є., Булатецька Л.В., Божко В.В., Парасюк О.В., Воронюк С.В., Шаварова Г.П. Фізичні властивості тетраарних халькогенідів. – Луцьк: РВВ Волинського нац. універ. – 2009. – 210с.
4. Электронная теория неупорядоченных полупроводников / [В.Л. Бонч - Бруевич, И.П. Звягин, Р. Кайпер и др.] – М.: Наука, 1981. – 672с.

УДК 621. 315. 592

## НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНА ЗАЛЕЖНІСТЬ ЕЛЕКТРОПРОВІДНОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{InSe}_2$

Паліюк О. М.<sup>1</sup>, Новосад О. В.<sup>2</sup>, Божко Н. А.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>магістр кафедри ФТТ та ІВТ Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,  
e-mail: Ksusha-893@mail.ru,

<sup>2</sup>завідувач лабораторії кафедри ФТТ та ІВТ

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: ovosa@ukr.net,

<sup>3</sup>аспірантка Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки

В роботі досліджено температурну залежність електропровідності монокристалічних твердих розчинів  $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{InSe}_2$ , де ( $x=0-0,2$ ). Дослідження температурної залежності електропровідності монокристалів проводилось в інтервалі температур (27-300 К). На основі експериментальних результатів проаналізовано особливості механізмів струмоперенесення в  $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{InSe}_2$ .

Для всіх зразків системи  $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{InSe}_2$  температурна залежність електропровідності в температурному інтервалі (27-300 К) виявилася складною неекспоненційною функцією. Більш детальний аналіз показав, що при температурах від 27 до ~80 К у сполуках  $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{InSe}_2$  може реалізуватися стрибковий механізм провідності[1].

Результати досліджень температурної залежності електропровідності монокристалів  $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{InSe}_2$  представлені на рис. 1. З рис. 1 видно, що в досліджуваних монокристалах температурні залежності електропровідності в інтервалі температур 27-120 К добре описуються прямою лінією в координатах Мотта. У такому випадку, згідно з [1, 2], провідність кристалів обумовлюється



стрибковим механізмом. Крім того, довжина стрибків є змінною. Стрибки електронів здійснюються по локалізованих станах, які розміщені у вузькій смузі енергій поблизу рівня Фермі ( $E_F$ ). Про стрибковий механізм електропровідності в сполуках  $\text{CuInSe}_2$  повідомлялося в [3-5].

Температурна залежність електропровідності в такому випадку описується формулою

$$\sigma = \frac{\sigma'_0}{\sqrt{T}} \cdot \exp\left(-\left(T_0/T\right)^{1/4}\right) \quad (1).$$

У формулі (1) характеристична температура  $T_0$  і множник  $\sigma_0$ , згідно з [2], визначаються як:

$$T_0 = \frac{\lambda \alpha^3}{k_B N_F} \quad (2),$$

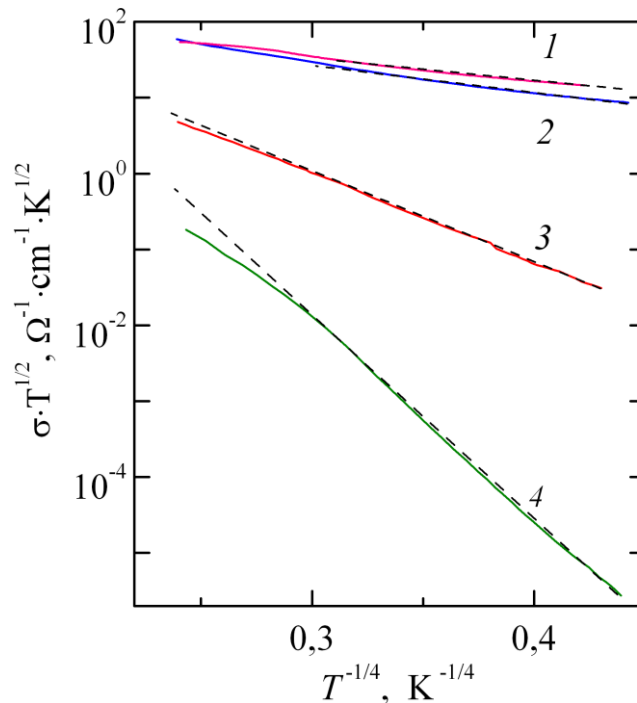


Рис. 1. Температурні залежності електропровідності монокристалів  $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{InSe}_2$  при різних значеннях "x": 1 – 0,05; 2 – 0,10; 3 – 0,15; 4 – 0,20.

$$\sigma'_0 = 3e^2 v_{ph} \left( \frac{N_F}{8\pi k_B \alpha} \right)^{1/2} \quad (3),$$

де  $N_F$  - густина станів поблизу  $E_F$ ,  $\alpha$  – стала спаду хвильової функції ( $\psi \sim \exp(-\alpha/r)$ ) електрона, локалізованого поблизу  $E_F$ ,  $\lambda$  - безрозмірний коефіцієнт, згідно із [2],  $\lambda \approx 16-17$ ,  $e$  - заряд електрона,  $k_B$  - постійна Больцмана,  $v_{ph}$  - частота Дебая.

Таблиця 1. Параметри стрибкової провідності в монокристалах  $Cu_{1-x}Zn_xInSe_2$

$x$	$T_0, K$	$\sigma_0,$ $(\text{Ом}\cdot\text{см})^{-1}\cdot K^{1/2}$	$T_0/T(70 K)$	$N_F,$ $eB^{-1}\cdot\text{см}^{-3}$	$\varepsilon, \text{meV}$	$R, \text{нм}$
0,05	$1\cdot 10^3$	$10^2$	14	$2,3\cdot 10^{22}$	3	1,5
0,10	$2,3\cdot 10^3$	$3\cdot 10^2$	33	$1\cdot 10^{22}$	4	1,8
0,15	$5,4\cdot 10^5$	$4\cdot 10^3$	$7,7\cdot 10^3$	$4,3\cdot 10^{19}$	15	7
0,20	$1,4\cdot 10^7$	$2\cdot 10^6$	$2\cdot 10^5$	$1,7\cdot 10^{18}$	33	16

По нахилу прямолінійних ділянок температурної залежності електропровідності в координатах Мотта визначалася характеристична температура  $T_0$  (табл. 1). Однією з умов реалізації Моттівської моделі провідності в напівпровідниках є виконання умови  $T_0/T \gg 1$  [6, 7]. Розраховані нами значення  $T_0/T$  представлені в табл. 1. При розрахунках вважалося, що  $T=70 K$ . Для монокристалів з 5 та 10 мол. %  $ZnIn_2Se_4$  спостерігалось значне зменшення параметра  $T_0$  і співвідношення  $T_0/T$  наближалось до 1. Тому модель стрибкової провідності для цих сплавів ставала менш обґрунтованою.

Для визначення середньої термічної енергії активації стрибка використовували формулу [2]:

$$\varepsilon = \frac{3}{4\pi R^3 N_F} \quad (4),$$

де  $R$  – середня довжина стрибка при Моттівській провідності, яка визначається формулою [2]:

$$R = \left( \frac{9}{8\pi \alpha k T N_F} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (5).$$

Розраховані за формулами 1-5 параметри стрибкового механізму провідності в монокристалах  $Cu_{1-x}Zn_xInSe_2$  представлені в таблиці 1.

Дефектними центрами, відповідальними за формування зони локалізованих станів, по яких реалізується стрибковий механізм провідності, можуть бути  $V_{Cu}$ . На користь даного припущення свідчить сильна залежність отриманих значень  $N_F$  від складу твердого розчину і, відповідно,  $V_{Cu}$ . Положення такої зони визначає положення  $E_F$  при низьких температурах, в нашому випадку  $T < 100 K$ . Згідно з [8], в сполуках  $CuInSe_2$   $V_{Cu}$  створюють акцепторні рівні, розміщені на 0,7 eV вище валентної зони. Також на користь даного припущення можна використати зростання характеристичної температури  $T_0$  зі зростанням  $V_{Cu}$ , оскільки  $T_0$  залежить від величини розупорядкування в кристалі [9,10].

#### Список літератури:

1. Electron theory of disordered semiconductors / [V. L. Bonch-Bruевич, I. P. Zvyagin, R. Kapper at al.]. – Moscow : Nauka, 1981. – 384 p.
2. Mott N. F. Electronic processes in non-crystalline materials / N. F. Mott, E. A. Davis. – Oxford: Clarendon Press, 1971. – 437 p.

3. Effect of deviations from stoichiometry on electrical conductivity and photoconductivity of CuInSe<sub>2</sub> crystals / M. A. Abdullaev, Dz. Kh. Magomedova, R. M. Gadzhieva [at al.] // Semiconductors. – 2001. – Vol. 35, №8. – P. 870–872.
4. Guillén C. Investigations of the electrical properties of electrodeposited CuInSe<sub>2</sub> thin films / C. Guillén, J. Herrero // J. Appl. Phys. – 1992. – Vol. 71, № 11. – P. 5479–5483.
5. Properties of CuInSe<sub>2</sub> films obtained by methods of selenization and quasi-equilibrium deposition / T. M. Gadzhiev, A. A. Babaev, R. M. Gadzhieva [at al.] // Inorganic Materials. – 2008. – Vol. 44, № 12. – P. 1295–1299.
6. CuInS<sub>2</sub> based thin film solar cell with 10,2 % efficiency / R. Scheer, T. Walter, H. W. Schock [at al.] // Appl. Phys. Lett. – 1993. – Vol. 63, № 24. – P. 3294–3296.
7. Electrical and optical properties of solid solutions Cu<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>InSe<sub>2</sub> (x=0,05 – 0,2) / V. V. Bozhko, G. Ye. Davyduyk, O. V. Parasyuk [at al.] // Ukr. J. Phys. – 2010. – Vol. 55, № 3. – P. 312–316.
8. Properties of CuInSe<sub>2</sub> films obtained by methods of selenization and quasi-equilibrium deposition / T. M. Gadzhiev, A. A. Babaev, R. M. Gadzhieva [at al.] // Inorganic Materials. – 2008. – Vol. 44, № 12. – P. 1295–1299.
9. M. Iwai, T. Onishi, K. Abe, Y. Miyoshi, K. Wakita / Analysis of photoluminescence spectra on CuInS<sub>2</sub> crystals // In: Int. Conf. Physics-2005, Baku, 7–9 June, 2005, P. 804–807.
10. Ueng H. Y. Defect identification in undoped and phosphorus-doped CuInS<sub>2</sub> based on deviations from ideal chemical formula / H. Y. Ueng, H. L. Hwang // J. Appl. Phys. – 1987. – Vol. 62, № 2. – P. 434–438.

УДК 544.344.01

## СИСТЕМИ TlInS<sub>2</sub>(Se<sub>2</sub>) – CdS(Se)

**Піскач Л. В.<sup>1</sup>, Фічук К. С., Піскач М. Ф.**

<sup>1</sup>кандидат хімічних наук, доцент, кафедра неорганічної та фізичної хімії

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: lyuda0760@ukr.net

Отримання нових матеріалів на основі потрійних халькогенідних сполук типу TlA<sup>III</sup>X<sub>2</sub> (A = In, Ga; X = S, Se) – ізоелектронних аналогів відомих напівпровідників груп A<sup>III</sup>B<sup>V</sup> і A<sup>II</sup>B<sup>VI</sup> є актуальним завданням. Ці шаруваті кристали та тверді розчини на їх основі перспективні для застосування в нелінійній оптиці, лазерній техніці, в напрямку створення приймачів для видимої та ІЧ-областей спектра, рентгендетекторів та інших перетворювачів.

Представлені результати стосуються встановлення характеру взаємодії у системах TlInS<sub>2</sub>(Se)<sub>2</sub> – CdS(Se).

TlInS<sub>2</sub> плавиться конгруентно при 1048 К і володіє поліморфним перетворенням при 803 К. Відомо п'ять стабільних структурних модифікацій цієї сполуки – моноклінна, гексагональна, ромбічна, тетрагональна та триклінна. При нормальному тиску залежно від способу отримання можливе існування двох стабільних кристалографічних модифікацій TlInS<sub>2</sub>: гексагональної (ПГ R63/mmc) та моноклінної (ПГ C2/c) [1]. TlInSe<sub>2</sub> також конгруентна сполука (1053 К), яка кристалізується в тетрагональній ґратці типу TlSe, просторова група симетрії I4/mcm [2]. Бінарні кадмій халькогеніди – конгруентні сполуки з температурами плавлення 2023 К при 100 бар (CdS)

та 1512 К (CdSe), що можуть існувати в структурах сфалериту (ПГ  $F-43m$ ) чи вюрциту (ПР  $P6_3mc$ ) [3].

Для дослідження взаємодії компонентів у системах отримано 27 зразків. Вихідні потрійні сполуки  $TlInS_2$  і  $TlInSe_2$  були синтезовані з простих речовин високої чистоти талію, індію, сірки, чи селену чистоти не менше 99,999 %. Дані потрійні сполуки служили вихідними матеріалами для синтезу усіх сплавів досліджуваних систем, які були взяті в стехіометричних співвідношеннях із кадмієм, сіркою чи селеном. Синтез проводився сплавленням розрахованих кількостей компонентів у вакуумованих до  $10^{-3}$  Па кварцових ампулах. Максимальна температура складала 1000–1350 К залежно від складу зразків. Всі сплави відпалювались при 670 К протягом 250 год, після чого проводилось їх загартування в 20-ти % водний розчин NaCl.

Дослідження здійснювали методами диференційно-термічного (ДТА) та рентгенофазового (РФА) аналізів. Запис кривих ДТА проводили на дериватографі системи Paulik-Paulik-Erdey з використанням комбінованої Pt/Pt-Rh термопари, РФА здійснювали за порошкограмами, знятими на дифрактометрі ДРОН 4-13 ( $CuK_{\alpha}$ -випромінювання).

Для вихідних сполук було проведено ідентифікацію і визначено експериментальні параметри елементарних комірок (670 К). Зафіксовано, що:  $TlInS_2$  індексуються в гексагональній модифікації (ПГ  $P6_3/mmc$ ) з параметрами елементарної комірки:  $a = 0,3827$ ,  $c = 1,4875$  нм;  $TlInSe_2$  – в структурі  $TlSe$  (ПР  $I4/mcm$ ,  $a = 0,80766$ ,  $c = 0,68417$  нм); CdS та CdSe – в структурі вюрциту (ПГ  $P6_3mc$  з параметрами  $a = 0,41348$ ,  $c = 0,67490$  нм і  $a = 0,42994$ ,  $c = 0,70104$  нм відповідно), що узгоджується з літературними даними [1-3].

За результатами проведених досліджень встановлено, що системи  $TlInS_2(Se_2) - CdS(Se)$  характеризуються евтектичним типом взаємодії. На основі вихідних компонентів при 620 К утворюються тверді розчини протяжністю 5-7 мол. %:  $\alpha$  – на основі високотемпературної модифікації  $TlInS_2$  та  $TlInSe_2$ ,  $\alpha'$  – на основі низькотемпературної модифікації  $TlInS_2$ ,  $\beta$  – на основі бінарних халькогенідів. Координати нонваріантних процесів  $L \leftrightarrow \alpha + \beta$ : 12 мол. % CdS (965 К), 23 мол. % CdSe (940 К). Перитектоїдний процес в системі  $TlInS_2 - CdS$  за участі тернарного сульфїду протікає при 868 К. Наявність поліморфізму  $TlInS_2$  ускладнює фізико-хімічну взаємодію в системі  $TlInS_2 - CdS$ . Так, у підсолідусній частині при 868 К відбувається перитектоїдний нонваріантний процес  $\beta + \alpha \leftrightarrow \alpha'$ . Збільшення в сплавах концентрації CdS підвищує температуру поліморфного перетворення від 803 К.

#### **Список літератури:**

1. Range K.-J. Hoch-drucksynthese und kristal-istrukturen von  $TlInS_2$ -II und  $TlInS_2$ -III / K.-J. Range, G. Engert, W. Muller, A. Weiss // Z. Naturforsch. – 1974. – В.29. – S. 181.
2. Mueller D. Über ternäre Thalliumchalkogenide mit Thalliumselenidstruktur / D. Mueller, G. Eulenberger, H. Hahn // Z. Anorg. Allg. Chem. – 1973. – № 398. – P. 207–220.
3. Абрикосов Н. Х. Полупроводниковые халькогениды и сплавы на их основе / Н. Х. Абрикосов, В. Ф. Банкина, Л. В. Порецкая – М.: Наука. – 197.

**ФОТОПРОВІДНІСТЬ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ  $\text{CuInS}_2\text{-ZnIn}_2\text{S}_4$** **Пойман О. М.<sup>1</sup>, Новосад О. В.<sup>2</sup>, Денисюк М. І.<sup>3</sup>**<sup>1</sup>студентка V курсу фізичного факультету

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: Poyman@ukr.net,

<sup>2</sup>завідувач лабораторії кафедри ФТТ та ІВТ

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: e-mail: ovosa@ukr.net,

<sup>3</sup>студентка III курсу фізичного факультету

Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки

Досліджено спектральний розподіл фотопровідності твердих розчинів  $\text{CuInS}_2\text{-ZnIn}_2\text{S}_4$ . Монокристали  $\text{CuInS}_2\text{-ZnIn}_2\text{S}_4$  відповідали компонентному складові 4, 8, 12 мол.%  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$ . Зразки з 16 мол.%  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$  виявились двофазними. Дослідження спектрів фотопровідності проводилося при  $T=300\text{ K}$ .

Завдяки оптимальному поєднанню величини ширини забороненої зони ( $E_g \approx 1,5\text{ eV}$ ) та високого значення коефіцієнта поглинання світла ( $\alpha \approx 10^5\text{ cm}^{-1}$ ) [1] сполука  $\text{CuInS}_2$  та тверді розчини на її основі використовуються в оптоелектроніці як матеріали поглинаючого шару фотоелектричних перетворювачів сонячного випромінювання [2-4]. Слід відмітити, що використання твердих розчинів на основі  $\text{CuInS}_2$  та подібних матеріалів є одним із методів розширення та покращення функціональних можливостей приладів напівпровідникової електроніки. Як показали численні експериментальні результати, фізичні властивості даних матеріалів визначаються, в значній мірі, точковими дефектами кристалічної решітки [5-8]. Дослідження впливу дефектів кристалічної решітки на фізичні властивості цих матеріалів може відкрити нові шляхи задання їх електричних і спектральних характеристик.

На рис. 1 зображено спектри фотопровідності твердих розчинів  $\text{CuInS}_2\text{-ZnIn}_2\text{S}_4$  різного компонентного складу. Вважаючи, що за максимумами спектрального розподілу фотопровідності відповідальні власні оптичні переходи, можна оцінити ширину забороненої зони ( $E_g$ ) твердих розчинів  $\text{CuInS}_2\text{-ZnIn}_2\text{S}_4$ . Вона виявилась близькою до величини  $E_g$ , оціненої по положенню краю смуги власного поглинання [9]. Велика розмитість максимумів фоточутливості та залежність їх положення від складу твердого розчину, а також фоточутливість в домішковій області спектрального розподілу фотопровідності ставить тверді розчини  $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{InS}_2$  в ряд перспективних матеріалів для фотодатчиків світла ближньої інфрачервоної області з широким спектром фоточутливості.

На рис. 2 наведена залежність  $E_g$ , оціненої по положенню максимуму фотопровідності, від складу твердого розчину. Слід відмітити, що, згідно з [1], максимум спектра фотопровідності при

300 К у монокристалах  $\text{CuInS}_2$  відповідає енергії квантів світла 1,49 еВ (на рис.2. точка, що відповідає 0 мол.%  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$ ), що узгоджується з нашими результатами. З представлених на рис.1 та рис.2. результатів можна зробити висновки, що, змінюючи вміст другої компоненти, можна плавно змінювати  $E_g$  та область максимальної фоточутливості кристалів.

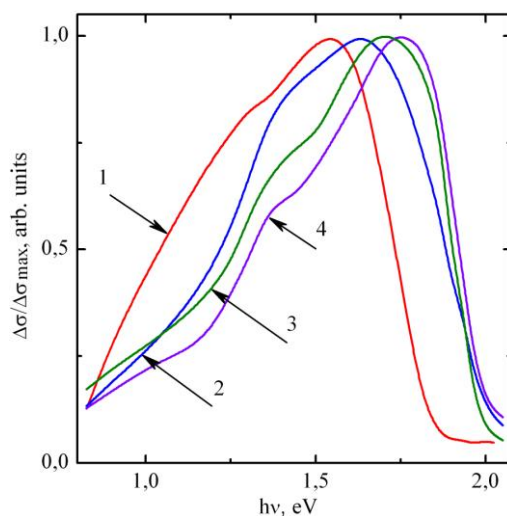


Рис.1. Спектральний розподіл фотопровідності твердих розчинів  $\text{CuInS}_2\text{-ZnIn}_2\text{S}_4$  з різним вмістом " $\text{ZnIn}_2\text{Se}_4$ ", мол %: 1 – 4; 2 – 8; 3 – 12, 4 – 16.

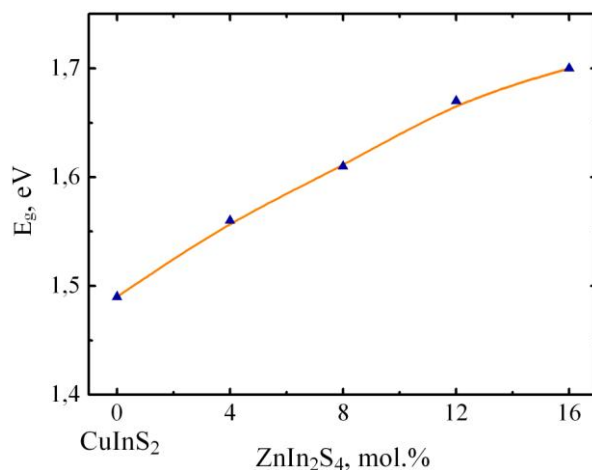


Рис.2. Залежність ширини забороненої зони твердих розчинів  $\text{CuInS}_2\text{-ZnIn}_2\text{S}_4$  від складу.

Фотопровідність в домішковій області, очевидно, обумовлена фотозбудженням електронів з акцепторних рівнів, пов'язаних з катіонними вакансіями, роль яких в  $\text{CuInS}_2$  можуть виконувати  $V_{\text{Cu}}$  [10]. Згідно з [10],  $V_{\text{Cu}}$  утворюють акцепторні рівні, розміщені на 0,1-0,2 еВ вище валентної зони. З [11, 12] відомо, що при утворенні твердого розчину  $\text{CuInS}_2\text{-ZnIn}_2\text{S}_4$  атоми  $\text{Cu}$  заміщаються атомами  $\text{Zn}$  в їх кристалографічній позиції  $4a$  з утворенням тетраедричних пустот (один атом  $\text{Zn}$  заміщує два атоми  $\text{Cu}$ ), внаслідок чого виникають  $V_{\text{Cu}}$ , що можна використати на користь нашого припущення.

#### Список літератури:

1. Иванов В. А. Излучательные и фотоэлектрические свойства монокристаллов  $\text{CuInS}_2$  / В. А. Иванов, И. А. Викторов, В. Ф. Гременок // ЖТФ. – 2002. – Т. 72, № 9. С. 134-136.

2. CuInS<sub>2</sub> based thin film solar cell with 10,2 % efficiency / R. Scheer, T. Walter, H. W. Schock [at al.] // Appl. Phys. Lett. – 1993. – Vol. 63, № 24. – P. 3294–3296.
3. Electrical properties of sprayed CuInS<sub>2</sub> films for solar cells / A. Mere, O. Kijatkina, H. Rebane [at al.] // J. Phys. Chem. of Solids. – 2003. – Vol. 64, № 9-10. – P. 2025–2029.
4. Lee D. ZnO-based nanostructuring strategy using an optimized solution process in CuInS<sub>2</sub> superstrate photovoltaics / Dongwook Lee, Kijung Yong // J. Phys. Chem. C – 2014. – Vol. 118, № 15. – P. 7788–7800.
5. Verheijen A. W. The region of existence of CuInS<sub>2</sub> / A. W. Verheijen, L. J. Giling, J. Bloem // Mater. Res. Bull. – 1979. – Vol. 14, № 32. – P. 237–240.
6. Ueng H. Y. Defect identification in undoped and phosphorus doped CuInS<sub>2</sub> based on deviations from ideal chemical formula // H. Y. Ueng and H. L. Hwang // J. Appl. Phys. – 1987. – Vol. 62, № 2. – P. 434-440.
7. Lablou N. Donor acceptor pair transitions in CuInS<sub>2</sub> / N. Lablou, G. Massé // J. Appl. Phys. – 1981. – Vol. 52, № 2. – P. 978-982
8. Garuthara R. Characterization of CuInS<sub>2</sub> thin films prepared by electrodeposition and sulfurization with photoluminescence spectroscopy / Rohana Garuthara, Ruwan Wijesundara, Withana Siripala // Solar Energy Mater & Solar Cells. – 2003. –
9. Особливості електропровідності, термо-ЕРС та оптичного поглинання твердих розчинів CuInSe<sub>2</sub>-ZnIn<sub>2</sub>Se<sub>4</sub> та CuInS<sub>2</sub>-ZnIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub> / В. В. Божко, Г. С. Давидюк, О. В. Новосад, В. Р. Козер, О. В. Парасюк // Наук. вісн. Вол. нац. ун-ту ім. Лесі Українки: Фіз. науки. – 2008. – №. 18. – С. 3–10.
10. Свойства поверхности CuInS<sub>2</sub> и влияние на них органических слоев // А. Б. Вербицкий, Я. И. Верцимаха, П. Н. Луцки, С. Л. Студзинский, С. Березнев, Ю. Койс // ФТП. – 2006. – Т. 40, № 2. С. 202-206.
11. Electrical and photoelectrical properties of CuInS<sub>2</sub>-ZnIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub> solid solutions / V. V. Bozhko, A. V. Novosad, G. E. Davidyuk, V. R. Kozher, O. V. Parasyuk, N. Vainorius, V. Janonis, A. Sakavičius, V. Kazukauskas // Journal of Alloys and Compounds. – 2013. – Vol. 553. – P. 48–52.
12. Solid-state solutions of copper indium disulfide and zinc indium tetrasulfide: Growth, crystallography and opto-electronic properties / V.V. Bozhko, A.V. Novosad, G.E. Davidyuk, V.R. Kozher, O.V. Parasyuk, N. Vainorius, A. Sakavičius, V. Janonis, V. Kazukauskas // Materials Science in Semiconductor Processing. – 2014. – Vol. 24. – P. 231-236.

УДК 539.25, 539.261

## МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ РОЗМІРІВ НАНОЧАСТИНОК ОКСИДУ ЦИНКУ АНАЛІЗОМ РЕНТГЕНІВСЬКОГО ПРОФІЛЮ

**Рудик Б. П.<sup>1</sup>, Мороз М. В.**

кафедра хімії та фізики, Національний університет водного господарства і природокористування,  
e-mail: <sup>1</sup>rexismundi@gmail.com

Слово “напівпровідник” уперше вжив Вольта у 1782 році, а у 1833р. Майкл Фарадей спостерігав відмінну, від звичного для металів, температурну залежність електричного опору сульфїду срібла. Так починалася ера напівпровідників, що докорінно змінила наш світ, сьогодні неможливо уявити, яким би був світ без напівпровідникової індустрії, що стрімко розвинулась впродовж останніх 60 років.

Оксид цинку (ZnO) є прямозонним напівпровідником групи A<sup>2</sup>B<sup>6</sup>, з широкою забороненою зоною E<sub>g</sub>=3,36eV. ZnO має екситон з значною енергією зв'язку ~60meV (наприклад для GaN

~25meV), велика енергія екситону дає широкі можливості до створення світловипромінювальних діодів та лазерів в УФ та синьо-зеленому діапазоні, електронно-польових дисплеїв [1].

Полікристалічний ZnO відомий досить давно, та має широке застосування у промисловості (не як напівпровідниковий матеріал) у якості пігменту для фарб (цинкові білила), люмінофору, каталізатора синтезу метанолу, складником деяких резин, маючи антисептичну дію широко застосовується у фармації та косметичі (присипки, креми, мазі тощо). Проте високодисперсна форма ZnO сьогодні має найбільші перспективи через квантово-розмірні ефекти, які проявляються при таких розмірах. П'єзоелектричні властивості дозволяють побудувати різноманітні давачі та сенсори. Оксид цинку володіє високою електрохімічною стійкістю, є нетоксичним, екологічно нешкідливим та біологічно сумісним з організмом людини.

Усі ці риси вказують на великі перспективи даного матеріалу, тому впродовж останнього десятиліття ZnO перебуває у фокусі багатьох науковців по всьому світу. Варто зазначити, що оксид цинку є досить поширеним у природі, його поклади оцінюють у  $4,5 \cdot 10^{12}$  т та економічно привабливим матеріалом – вартість 1 кг близько 1 USD.

Наночастинки оксиду цинку (рис.1) були отримані за методикою описаною у [2]. Рентгеноструктурний аналіз показав, що положення дифракційних максимумів відповідають гексагональній формі вюртциту (просторова група  $P6_3mc$  у якій кристалізувався ZnO) та відповідає стандарту JCPDS 36-1415. Параметри елементарної комірки становлять  $a=3,25\text{\AA}$ ,  $c=5,20\text{\AA}$ , їхнє співвідношення складає  $c/a \approx 1,6$ .

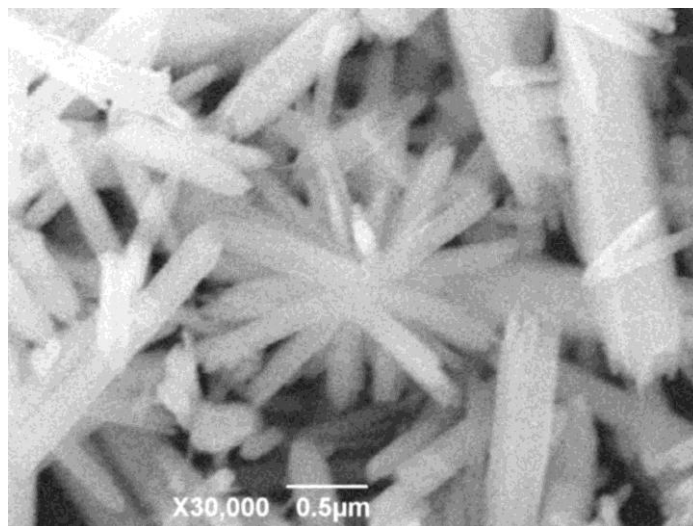


Рис 1. Фотографія наночастинок ZnO отримана електронною скануючою мікроскопією

Досить давно існують методики визначення (оцінки) розмірів нанокристалітів за профілем дифрактограм. Так, у 1918р. Шерер вперше спостерігав збільшення ширини дифракційних профілів на половині висоти при аналізі дифрактограм отриманих від малих кристалів. Зрозуміло, що на вимірне значення  $\beta_0$  буде накладатися інструментальна похибка обладнання  $\beta_{instrumental}$ , тому шукане значення  $\beta$  буде



$$\beta^2 = \beta_0^2 - \beta_{instrumental}^2.$$

Для визначення величини інструментальної похибки  $\beta_{instrumental}$  проводять калібрування обладнання порівнюючи профілі, що були отримані від еталонних матеріалів (зазвичай це полікристалічний кремній), з стандартами.

Отримане Шерером співвідношення встановлює залежність розміру кристалітів  $D$  від півширини на половині висоти  $\beta_D$ :

$$D = \frac{k\lambda}{\beta_D \cos \theta}, \text{ або } \beta_D = \frac{k\lambda}{D \cos \theta}$$

де:  $k$  – коефіцієнт, який залежить від форми частинок, для еліпсоїда  $k = 0,89$ ;  $\lambda$  – довжина хвилі рентгенівського випромінювання;  $\beta_D$  – півширина на половині висоти рентгенівського профілю;  $\theta$  – кут дифракції рентгенівських променів.

Проте, це рівняння не включає у себе вклад механічних напружень  $\varepsilon$ , які описуються залежністю  $\varepsilon = \beta_{tension}/4 \text{tg } \theta$ , тому врахувавши цей вклад  $\beta_{tension}$  узагальнимо для  $\beta$ :

$$\beta = \beta_D + \beta_{tension}$$

або

$$\beta = \frac{k\lambda}{D \cos \theta} + 4\varepsilon \text{tg } \theta$$

Перепишемо вираз у формі:

$$\beta \cos \theta = \frac{k\lambda}{D} + 4\varepsilon \sin \theta.$$

На цьому ґрунтується метод Вільямсона-Холла, який дозволяє визначити розміри та мікронапруження нанокристалітів побудовою лінійного графіку  $\beta \cos \theta$  у координатах  $4 \sin \theta$  (рис.2). У нашому випадку нахил кривої вказував на наявність деформації стиску  $\varepsilon=0,0023$ , розміри частинок становили  $D=170\text{нм}$ .

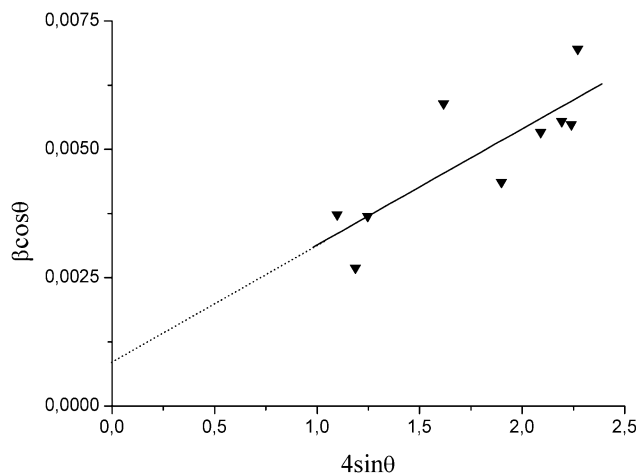


Рис.2 Визначення механічних напруг у кристалах методом Вільямсона-Холла. Нахил апроксимуючої прямої вказує на величину та знак деформацій

Використання методу Вільямсона-Холла дає можливість не тільки оцінити розмір, але й механічні напруження у нанокристалах аналізуючи профілі рентгенівських діаграм.

**Список літератури:**

- 1.Ö. Üzgür. ZnO Devices and Applications: A Review of Current Status and Future Prospects: Proceedings of the IEEE 98, issue 7, 2010.
- 2.Гаевський В.Р., Нечипорук Б.Д., та ін. Електролітичний метод отримання наночастинок оксиду цинку, УФЖ, 2013, т. 58, N 4.
- 3.Mote et al. Williamson-Hall analysis in estimation of lattice strain in nanometer-sized ZnO particles. Journal of Theoretical and Applied Physics 2012, 6:6.

УДК 621.315.592

## **ОСНОВНІ УЯВЛЕННЯ ПРО СТРУКТУРУ ОКСИДНИХ ТА ХАЛЬКОГЕНІДНИХ СТЕКОЛ**

**Семенюк Т. А.<sup>1</sup>, Іщук І. М.<sup>2</sup>, Рубчинська М. Л.<sup>3</sup>, Кевшин А. Г.<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>студентка III курсу Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,  
e-mail: semenyk.94@mail.ru,

<sup>2</sup>студентка IV курсу Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,  
e-mail: Martovskiy.cot@mail.ru,

<sup>3</sup>студентка IV курсу Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки,  
e-mail: iim93@mail.ru,

<sup>4</sup>кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри загальної фізики та методики викладання фізики  
Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, e-mail: kevsyin\_A@ukr.net

Некристалічні тверді тіла в останні роки привертають значну увагу фізиків, що працюють в області, як фундаментальних досліджень, так і прикладних розробок. Ці матеріали знайшли широке застосування в системах реєстрації, збереження й обробки оптичної інформації, в електроніці як перемикачі, датчики і т.д. [1], при створенні наноструктур методами електронної літографії [2; 3], як реєструючі структури аналогових і голографічних зображень. Такі системи характеризуються, з одного боку, відсутністю далекого порядку, тобто строгої періодичності розташування атомів в мікрооб'ємі, з іншого – наявністю ближнього порядку, тобто впорядкованим розподілом координат найближчих сусідів для будь-якого атома. Найбільш поширеними для використання в промисловості серед некристалічних твердих тіл є халькогенідні та оксидні стекла.

Група халькогенідних стекел охоплює широке коло хімічних сполук, які характеризуються тим, що містять один або декілька елементів 6-й групи системи елементів – так званих халькогенів (S, Se, Te). Склоутворення можливе при поєднанні халькогенів з різними елементами, такими як

As, Ge, Si, Pb, Tl, P, Sb, Bi, наприклад,  $\text{GeS}_2$ ,  $\text{P}_4\text{Se}_4$ ,  $\text{As}_2\text{Te}$ . Характерною особливістю халькогенідних стекел є можливість істотного відхилення складу від стехіометричного. Для певної, заданої системи елементів, як правило, неможливо отримати стекла будь-якого складу, тобто існують певні області склоутворення, в межах яких аморфні матеріали можуть бути отримані швидким охолодженням розплаву.

Склоподібні халькогенідні сполуки є більш термодинамічно стійкими, порівняно з аморфними германієм і кремнієм. Тому їх відпал зазвичай не призводить до суттєвих змін фізичних властивостей.

Серед неупорядкованих оптичних матеріалів найбільшого поширення набули оксидні стекла, які являють собою тверді аморфні матеріали, отримані при охолодженні розплавів окислів. Хімічний склад оксидних стекел дуже різноманітний. Як основний компонент вони містять один із «склоутворюючих» –  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{GeO}_2$ ,  $\text{P}_2\text{O}_5$ ,  $\text{B}_2\text{O}_3$ . Відповідні стекла називаються «силікатні», «германатні», «фосфатні», «боратні».

Інформацію про ближній порядок структури скла дають, в основному, дифракційні методи, які включають не тільки використання рентгенівського випромінювання, але й використання електронних і нейтронних пучків. Досить ефективними є також методи засновані на аналізі тонкої структури спектрів поглинання рентгенівського випромінювання EXAFS, XANES. Застосування названих методів дозволило встановити наявність у склі таких же фрагментів структури ближнього порядку – «структурних цеглинок», які є у відповідних кристалах. У силікатних стеклах – це тетраедри  $[\text{SiO}_4]$ , германатних –  $[\text{GeO}_4]$  і октаедри  $[\text{GeO}_6]$ , фосфатних – тетраедри  $[\text{PO}_4]$ , боратних – трикутники  $[\text{BO}_3]$  і тетраедри  $[\text{BO}_4]$ , у халькогенідних стеклах – тетраедри побудовані на основі халькогена і склоутворюючого елемента.

В халькогенідних та оксидних стеклах іонна складова хімічного зв'язку невелика і носить в значній степені ковалентний характер.

В стеклах найбільш простого складу, обмеженого одним склоутворюючим окислом, хімічні зв'язки утворюють безперервну просторову сітку. Наприклад, в кварці ( $\text{SiO}_2$ ) кожен іон кремнію пов'язаний з чотирма іонами кисню, а кожен іон кисню з двома іонами кремнію. Іони кисню в цьому випадку називаються «містковими», так як вони з'єднують структурні одиниці – тетраедри. Два тетраедра можуть мати тільки одну загальну вершину, але не спільне ребро або грань. Окремі екземпляри тетраедрів, строго кажучи, не однакові. Але ці відмінності не дуже великі. Основним проявом неупорядкованості структури є можливість зміни в широких межах відносного розташування тетраедрів, що характеризується кутами  $\alpha$  і  $\varphi$  (рис. 1).

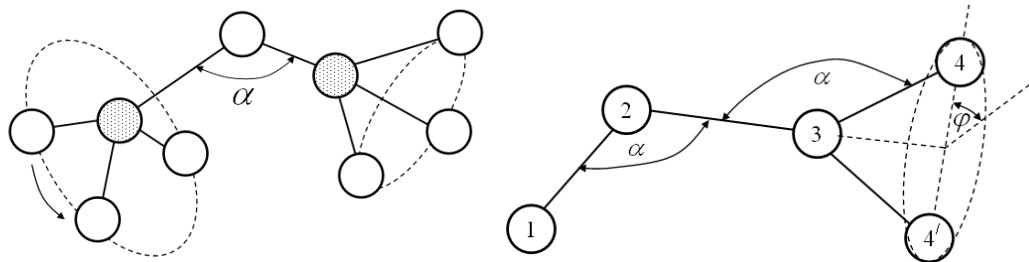


Рис. 1. Відносне розташування тетраедрів, що характеризується кутами  $\alpha$  і  $\phi$  [4]

Введення в склад скла інших окислів крім склоутворюючого, призводить, як правило, до розривів у сітці зв'язків. Катіони таких окислів, називаються модифікаторами і розміщуються у великих пустотах сітки. Введені з ними іони кисню виявляються зв'язаними не більше ніж з одним склоутворюючим катіоном. Тому їх називають не містковими. Зв'язок модифікаторів з киснем носить іонний характер (таблиця 1).

Таблиця 1. Ступінь іонності зв'язку з киснем по Полінгу (%) [5]

Склоутворювачі		Проміжні елементи		Модифікатори	
P	39	Al	63	Mg	73
B	43	Be	63	РЗЕ	73-79
Si	51	Ti	63	Ca	79
Ge	55	Zr	67	Ba	82
				Na	82
				K	84

Крім типових склоутворювачів і модифікаторів виділяють елементи, що займають проміжне положення (таблиця 1). Прийнято вважати, що вони можуть входити в скло, не порушуючи сітку зв'язків. Наприклад, алюміній може заміщати кремній у центрі тетраедра.

Концепції модифікатора склоподібної сітки і склоутворювача, корисні при розгляді структури оксидних стекол, є незастосовними до халькогенідних стекол. В ці матеріали можна ввести тільки відносно малі кількості халькогенідів одно- і двовалентних елементів, і не можна з упевненістю сказати, що їх введення завжди призводить до утворення немісткових атомів. Доцільніше розглядати багато з цих стекол як сополімери складових елементів.

#### Список літератури:

1. Несеребряные фотографические процессы / под ред. А. Л. Картужанского. – Л. : Химия, 1984. – 376 с.
2. Микаэлян А. Н. Растры многофокусных голографических фазовых микроэлементов // А. Н. Микаэлян, А. Н. Палагушкин, С. А. Прокопенко // Доклады РАН. – 2002. – № 5. – С. 621.
3. Both holographic and electron-beam recording in new carbazolyl-containing photoresists / M. Andries Andrei, V. Bivol Valeriu, K. Ersoy Okan [et al.] // SPIE Proceeding. – 2004. Vol. 5581. – P. 531–545.
4. Фельц А. Аморфные и стеклообразные неорганические твердые тела / Фельц А. – М. : Мир, 1986. – 556 с.
5. Полинг Л. Общая химия / Л. Полинг. – М. : Мир., 1974. – 845 с.



**Міжнародну інтернет-конференцію молодих учених та студентів «АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ І ПРИКЛАДНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ» було проведено на базі платформи проекту «INFORUM.IN.UA» - порталу наукових онлайн інтернет конференцій.**

## **ЗАПРОШУЄМО НАУКОВІ ТА ОСВІТНІ УСТАНОВИ ДО СПІВПРАЦІ.**

Проект INFORUM.IN.UA покликаний популяризувати та робити більш доступними наукові здобутки студентів, аспірантів та провідних вчених як з України, так і з-за кордону. INFORUM.IN.UA – це інтернет-портал, на якому представники наукової спільноти можуть у режимі реального часу обговорити важливі проблеми сучасності. Ми об'єднуємо найактуальніші тематики, авторитетних однодумців та опонентів.

Проект INFORUM.IN.UA надає можливість навчальним закладам, науковим товариствам та установам проводити інтернет-конференції на базі платформи проекту.

Якщо Вас зацікавив проект та Ви маєте бажання провести наукову інтернет-конференцію – зателефонуйте або напишіть нам. З Вами зв'яжуться представники команди проекту INFORUM.IN.UA.

Команда проекту INFORUM має значний досвід в організації та проведенні інтернет-конференцій (з 2011 року у співпраці з українськими ВНЗ було проведено 14 наукових інтернет-конференцій) та пропонує Вам спектр послуг, які за Вашим бажанням може взяти на себе:

- розміщення Ваших наукових інтернет-конференцій на базі платформи проекту;
- створення інформаційного листа для Ваших інтернет-конференцій трьома мовами (українська, російська, англійська);
- розсилка інформації про проведення Ваших конференцій у всі або визначені навчальні заклади України;
- розміщення анонсів та архівів Ваших інтернет-конференцій;
- забезпечення роботи форуму (обговорення) під час проведення конференції;
- надання інформаційної підтримки Вашої інтернет-конференції в соціальних мережах;
- форматування та видавництво друкованої збірки тез за матеріалами Ваших інтернет-конференцій та ін.

<http://www.inforum.in.ua>

<http://www.fb.com/inforuminua>

twitter: inforuminua

e-mail: [info@inforum.in.ua](mailto:info@inforum.in.ua)

tel: +38 (066) 426 31 33

tel: +38 (093) 391 11 36

**БУДЬТЕ В ТРЕНДІ НАУКИ РАЗОМ З НАМИ!**





Наукове видання

Міжнародна інтернет-конференція молодих учених та студентів  
**«АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ  
І ПРИКЛАДНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ»**

Збірник матеріалів конференції

International internet conference for young researchers and students  
**«TOPICAL ISSUES OF FUNDAMENTAL AND  
APPLIED STUDIES»**

**Conference Proceedings**

Друкується в авторській редакції  
Верстка І. В. Мартинюк

Відповідальність за достовірність фактів, власних імен, цитат, цифр та інших відомостей несуть автори публікацій.

Формат 60x84 1/16. Обсяг 6.97 ум. друк. арк., 6,9 обл.-вид. арк.  
Наклад 100 пр. Зам. \_\_\_\_\_. Видавець і виготовлювач – Вежа-Друк  
(м. Луцьк, вул. Бойка, 1, тел. (0332) 29-90-65).  
Свідоцтво Держ. комітету телебачення та радіомовлення України  
ДК № 4607 від 30.08.2013 р.