

МІЖНАРОДНА КОНФЕРЕНЦІЯ
МОЛОДИХ УЧЕНИХ І АСПІРАНТІВ
Інститут електронної фізики НАН України

ІЕФ-2015

Ужгород, 18–22 травня 2015
МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ



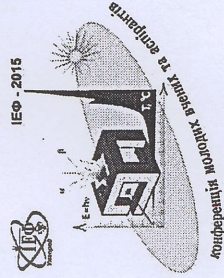
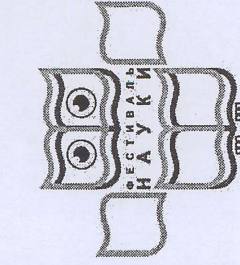
INTERNATIONAL CONFERENCE
OF YOUNG SCIENTISTS AND POST-GRADUATES
Institute of Electron Physics, Ukr. Nat. Acad. Sci.

IEP-2015

Uzhhorod, 18–22 May 2015

PROCEEDINGS OF THE CONFERENCE

Інститут електронної фізики
Національної академії наук України



ІЕФ-2015

Міжнародна конференція
молодих учених і аспірантів

Ужгород, 18–22 травня 2015 року

МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

IEP-2015

International Conference
of young scientists and post-graduates

Uzhhorod, 18–22 May 2015

PROCEEDINGS OF THE CONFERENCE

Ужгород 2015

БК В 3Г (4Укр – 43ак)

М 58

УДК 539.1

Збірник містить матеріали конференції. Довіді присвячені дослідженню явищ, що відбуваються у різноманітних атомних системах у газоподібному та конденсованому станах. Представлено також роботи з технологічних та фізичних особливостей отримання деяких речовин із заданими властивостями.

This book presents proceedings of the conference. The contributions are dedicated to the studies of the phenomena occurring in different atomic systems in free and condensed states. The papers on the studies of technological and physical peculiarities of the production of certain substances with preset properties are also included.

У к л а д а ч:

А.М. Завілопуло, доктор фізико-математичних наук, професор

Відповідальна за випуск:

Т.Ю. Потик, кандидат фізико-математичних наук

© ІЕФ НАН України, 2015

© А.М. Завілопуло, укладач, оригінал-макет, 2015

© Ю.М. Ажнюк, обкладинка, 2015

ISBN 978-966-2668-95-7

ІЕФ-2015

ПЕРЕДМОВА

ІЕФ-2015 продовжує традиції міжнародних наукових конференцій молодих учених, перша з яких відбулася в Інституті електронної фізики НАН України у 1993 році. Незважаючи на складні часи спостерігається постійний інтерес до конференції та прагнення молодих науковців до спілкування зі своїми колегами, що зумовлює динаміку кількості учасників: якщо у 1993 році їх було близько 20, то в цьому році отримано понад 100 тез доповідей з різних регіонів України та з-за кордону. На базі інституту протягом всіх років існування регулярно проводяться вітчизняні і міжнародні конференції та інші наукові форуми. Інститут є ініціатором і організатором багатьох міжнародних наукових конференцій і семінарів. Одними з перших були: семінар-трикутник Ужгород-Дєбрецен-Мішкольц, проведений у 1992 році, конференція, присвячена 75-річчю Академії наук України (1993 рік), міжнародний семінар "HADRON-94", міжнародна нарада "Сучасні технології в медицині" (1994 рік). У 1997 році інститут організував і провів конференцію "The Sentenau of Electron" (EL-100), присвячену 100-річчю відкриття електрона, та був співорганізатором конференції "Неевклідова геометрія в сучасній фізиці", яка з тих пір регулярно проводиться кожні два роки. У 2000 році інститут започаткував і провів Міжнародну конференцію "Елементарні процеси в атомних системах" (SERAS), яка стала проводитись кожні три роки і вже відбулась успішно у Гданську (Польща), Мішкольці (Угорщина), Клуژی-Напоці (Румунія), Белграді (Сербія), Браїсові (Словатчина). З 2001 року на базі Інституту електронної фізики регулярно проводиться міжнародні конференції молодих учених і аспірантів (ІЕФ'2001, ІЕФ'2003, ІЕФ'2005, ІЕФ'2007, ІЕФ'2009, ІЕФ'2011, ІЕФ'2013), Українські наукові конференції з фізики напівпровідників. У минулому 2014 році проведено дві конференції: II міжнародна конференція «Хімічна і радіаційна безпека: проблеми і рішення» та «XIV українська конференція з космічних досліджень» за участю іноземних вчених.

Історія Інституту електронної фізики НАН України починається у 1992 році, коли його було створено на базі Ужгородського відділення Інституту ядерних досліджень АН України. Основними напрямками наукової діяльності інституту є проведення фундаментальних та прикладних досліджень у галузі атомної і ядерної фізики низьких енергій, фізики електронних і атомних зіткнень, фізичної і квантової електроніки, нелінійної оптики; створення нових матеріалів та приладів функціональної електроніки. Інститут - відомий центр з дослідження резонансних і автоіонізаційних явищ в атомних системах та з радіаційної фізики твердого тіла.

В інституті склалися і функціонують наукові школи професора І.П. Запісочного з фізики електронних зіткнень та професора М.І. Головея з

They are seeing with diminished intensities in PL spectra from freshly fractured surfaces too (not shown). We suggest that this high-energy emission could be due to the presence of some types of GeO_x nanoclusters (Tabl) on surface and in native matrix of GeSe_2 glasses. This suggestion based on quantum-mechanical calculation of different type GeO_x defect clusters presented in [1].

Relative intensities (E , eV) oscillator strength (f) for lowering singlet state of single oxygen vacancies (OV), basic singlet; double oxygen vacancies (DOV), with geometrical parameters optimized for excited states [1].

Table 1

Defect, cluster, method	initial state,	$E(S_n)$, $f(0-n)$
OV, $(\text{H}_3\text{Ge}^+\text{O})_3\text{Ge-Ge}(\text{O}(\text{Ge}^+\text{H}_3)_3)_3$, CCSD	S_1 , CIS(D);	2.72, 0.80; 3.08
OV, $(\text{H}_3\text{Ge}^+\text{O})_3\text{Ge-Ge}(\text{O}(\text{Ge}^+\text{H}_3)_3)_3$, CCSD	S_2 , CIS(D);	2.98, 0.10; 3.31
DOV, $(\text{H}_3\text{Ge}^+\text{O})_3\text{Ge-Ge}(\text{O}(\text{Ge}^+\text{H}_3)_2\text{-Ge}(\text{O}(\text{Ge}^+\text{H}_3)_3)_3)$, CCSD	S_2 , CIS(D);	2.19, 0.45
DOV, $(\text{H}_3\text{Ge}^+\text{O})_3\text{Ge-Ge}(\text{O}(\text{Ge}^+\text{H}_3)_2\text{-Ge}(\text{OH})_3)$, CCSD	S_2 , CIS(D);	2.17, 0.43; 2.63

From the variety of oxygen-deficient defects the theoretical modeling shows that $\text{X}_3\text{Ge-GeX}_2$ ($\text{X}=\text{OH}$, OAH_3 , $\text{A}=\text{Ge}$) defect gives in $q\text{-GeO}_2$ only a red/orange PL band at 2.0–2.1 eV. Non-bridging oxygen in clusters $-\text{OGeX}_3$ ($\text{X}=\text{OGeH}_3$) type and E' center are corresponding for the PL emission at 1.59, 1.89 and 1.98 eV [1]. Oxygen related bands in the PL spectrum of an as-synthesized GeO_x perfect single crystal nanowire, which was excited at the OK-edge (536.5 eV), showed during fitting procedure four components at 1.90, 2.17, 2.42, and 2.70 eV. Thermal annealing of the GeO_x nanowire leads to the disappearance of the high energy bands at 2.42 and 2.70 eV and decreasing intensity of PL yield [2]. Redistribution of intensity in PL spectra (Fig. 2, Fig. 3) we connected with different amount of structural units (s.u.) in $g\text{-GeSe}_2(\text{T}_1\text{V}_1)$ with weak Ge-Ge bonds. Such s.u. are susceptible for oxidation (i.g. $\text{Ge}(\text{OH})_3$ formation, Tabl.), in ethane-like (250 cm^{-1}) and $\text{Ge}_{4/4}$ (290 cm^{-1}) s.u. Detailed assignment of the Raman bands for these samples has been done in [3].

We suggested that Ge oxidation of $\text{GeSe}_2(\text{T}_1\text{V}_1)$ plays an important role in radiative recombination processes in IR, visible and UV. This may be an effect related to the bulk Ge-oxygen impurities for freshly fractured glasses and surface contaminants due oxidation during long term aging.

- [1] A.S. Zyubin, A.M. Mebel, S.H. Lin, J. of Chem. Phys. 125,064701(2006).
 [2] Mingfa Peng, Yang Li, Jing Gao, Duo Zhang, Zheng Jiang, Xuhui Sun, J. Phys. Chem. C, 115, 1420–1426 (2011).
 [3] R. Holomb, P. Johansson, V. Mitsa, I. Rosola, Phil. Mag., 85, 2947 (2005).

ELECTROCONDUCTIVE PROPERTIES OF CROSS-LINKED POLYURETHANES/CARBON NANOTUBES COMPOSITES

E.V. Lobko¹, E.A. Lysenko², Z.O. Gagolkina¹, Yu.V. Yakovlev¹

¹Institute of Macromolecular Chemistry, NAS of Ukraine, Kyiv,

e-mail: lobko_zhenia@i.ua

²Mykolaiv National University the named after V.O. Sukhomlynskiy, Mykolaiv

Immobilization *in situ* in polymers, including polyurethanes (PUs), of low quantity of carbon nanotubes (CNTs) strongly improves the electrical, thermal and mechanical properties of the composites [1].

The cross-linked polyurethanes (CPU), modified with various amount (0,02-3%wt.) of multi-walled CNTs, were synthesized *in situ*. CNTs were dispersed in ultrasonic bath in dichloromethane (CH_2Cl_2) for 2,5 minute. Then the dispersion of CNTs in solvent were added into reaction mixture and dispersed for 2,5 minute again.

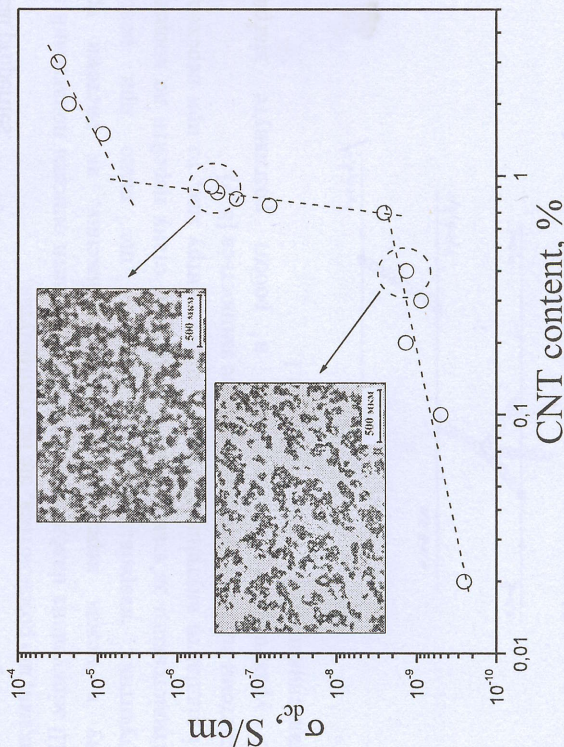


Fig. 1. Direct current conductivity vs. CNT content for the CPU/CNT system at $T = 293 \text{ K}$

значительно более высокое количество Ni, Fe, Cr и Co.

Акустические измерения выполнены методом механической резонансной спектроскопии. При повышении температуры от 4,2К до 320К динамический модуль Юнга E сплава монотонно понижается от 194ГПа до 182 ГПа, а поглощение возрастает. Значения E согласуются с данными [2] для сплавов подобного состава. Отжиг при 1243К в течение 6ч с последующим медленным охлаждением образца приводит к существенному ($\sim 20\%$) увеличению E , а также к появлению при температуре ~ 230 К пика акустического поглощения. Отжиг приводит к изменению структурно-фазового состава сплава при этом состав дендритных областей остаётся неизменным, а в междендритных областях происходит снижение содержания Cu и Al и повышение содержания остальных элементов. На границах между дендритными и междендритными областями происходит образование частиц, обогащенных Ni ($\approx 30\%$), Al ($>20\%$) и Cu ($>20\%$). Согласно [3] эта фаза имеет упорядоченную кристаллическую решетку типа B2. Эти результаты согласуются с [4] о высокотемпературном упрочнении после выдержки при 570–870 К.

В интервале 4,2–300К наблюдаются высокие значения прочности и пластичности сплава. Величина условного предела текучести $\sigma_{0,2}$ при повышении температуры от 4,2 до 300К изменяется значительно сильнее (от 700 до 430МПа, т.е. на 38,5%), чем величина модуля Юнга (на 6%). При температурах ниже 15К обнаружено изменение характера пластического течения от плавного к скачкообразному. В предположении термоактивированного характера пластической деформации для образцов в литом состоянии вычислены величины активационного объема для термоактивированного движения дислокаций, значения которого уменьшаются с понижением температуры от $122 \cdot b^3$ при 300К до $35 \cdot b^3$ при 30 К.

В литых образцах обнаружено аномальное уменьшение $\sigma_{0,2}$ от 700 МПа при 4,2 К до 570 МПа при 0,5К. В отожженном состоянии эта аномалия не наблюдается. Различия в свойствах литых и отожженных образцов связываются со структурно-фазовыми превращениями при отжиге, в частности с образованием выделений ОЦК фазы в ГЦК матрице [5].

- [1] Chung-Jin Tong, Yu-Liang Chen, Swe-Kai Chen et. al., Metallurgical and Materials Transactions A 2005. V.36A. P.881.
- [2] K.B. Zhang, Z.Y. Fu, J.Y. Zhang, W.M. Wang, H. Wang, Y.C. Wang, Q.J. Zhang, J. Shi., Materials Science and Engineering A. 2009. V.508. P.214.
- [3] D.G. Shaysultanov, N.D. Stepanov, A.V. Kuznetsov, G.A. Salishchev, O.N. Senkov., JOM. 2013. V.65 (12) P. 1815.
- [4] Che-Wei Tsai, Ming-Hung Tsai, Jien-Wei Yeh, Chih-Chao Yang., Journal of Alloys and Compounds. 2010. V.490. P.160.
- [5] Chun Ng, Sheng Guo, Junhua Luan, Sanqiang Shi, C.T. Liu., Intermetallics. 2012. V.31. P.165.

ВЗАЄМОЗВ'ЯЗОК ПРУЖНИХ МОДУЛІВ, РАМАН СПЕКТРІВ ТА ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ В ШИРОКОЗОННИХ ХАЛЬКОГЕНІДНИХ СТЕКЛАХ

О. Фегер¹, С. Петрецький², В. Ткач¹, В. Міца¹, Р. Голомб²

¹Університет Павла Йозефа Шафарика в Кошице, Словаччина
²Ужгородський національний університет, Ужгород, Україна
e-mail: v.mitsa@gmail.com

У халькогенідних стеклах теоретична залежність пружних модулів від середнього координаційного числа (z) передбачає ріст від двоохмірної 2D до 3D матриці структури стекл, починаючи із $z=2,4$ (рис. 1). Експериментально нами виявлено, що для різних розрізів стекл системи $Ge_xAs_yS_{1-x-y}$ залежність позовжніх пружних модулів (C_1) має свої особливості (рис. 2). Особливо помітні відхилення експериментальних значень C_1 від теоретично передбачуваних (рис.1) для стекл розрізу $As_{0,40}S_{0,60}-Ge_{0,40}S_{0,60}$ (рис.2). Такі відхилення вказують на суттєву зміну зв'язності структури в таких стекл. Порівняння Раман спектрів стекл стехіометричного $As_2S_3-GeS_2$ (рис.3) та нестехіометричного $As_2S_3-Ge_2S_3$ (рис.4) розрізів вказує на їх відмінність. Так, в Раман спектрах стекл $As_2S_3-Ge_2S_3$ в області проміжних складів виникають вузькі смуги в області спектру 100–300 cm^{-1} , характерні для коливань атомів в молекулярних кристалах реалгару, парареалгару та диморфиту [2].

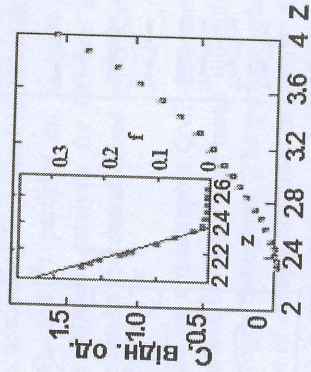


Рис. 1. Теоретична координаційна залежність C_1 в моделі Філіпса-Торпа [1].

Поява нанофазних включень в структурі стекл $(Ge_2S_3)_x(As_2S_3)_{100-x}$ в області проміжних складів зменшує їх зв'язність, що приводить до зменшення коефіцієнта теплопровідності (k) при $T=300$ К від 0,257 ($x=0$) до 0,125 Вт/Км ($x=40$). Для $x=1$ значення $k=0,285$ Вт/Км. Таким чином, зменшення зв'язності матриці структури в потрійних стеклах внаслідок нанофазових виділень зменшує теплопровідність, внаслідок чого, очевидно, зменшується відвід тепла