

МАТЕРІАЛИ ІІІ МІЖНАРОДНОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ
**ФУНКЦІОНАЛЬНІ
МАТЕРІАЛИ
ДЛЯ ІННОВАЦІЙНОЇ
ЕНЕРГЕТИКИ**

Facing the future



FUNCTIONAL MATERIALS
for INNOVATIVE ENERGY



KYIV 2021

**FUNCTIONAL
MATERIALS FOR
INNOVATIVE ENERGY**

У збірці представлено тези доповідей учасників III Міжнародної конференції «Функціональні матеріали для інноваційної енергетики. ФМІЕ–2021». Наведено основні результати експериментальних і теоретичних досліджень будови та властивостей функціональних матеріалів, самоорганізації їх структури, розробки методів одержання металів, сплавів, кераміки, композитів і напівпровідникових систем, в тому числі у наноструктурованому стані, вуглецевих наноматеріалів, плівок, покриттів і поверхневих систем, а також методів діагностики, атестації та моделювання функціональних матеріалів для інноваційної енергетики. Для фахівців у галузі матеріалознавства, електрохімії, електроніки, наноелектромеханіки та енергетичної техніки; може бути корисною викладачам, аспірантам і студентам за спеціальністю «прикладна фізика», «матеріалознавство», «наноматеріали та нанотехнології», представникам державних і комерційних компаній, орієнтованих на сучасну, відновлювальну та екологічно чисту енергетику.

ТЕМАТИКА КОНФЕРЕНЦІЇ ФМІЕ-2020

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

ЗМІСТ

Новітні функціональні матеріали для інновації традиційних енергокомплексів

1. Білодід Є.І., Кухочський О.В. Використання алюмінієвого сплаву у новітніх ядерних установках
2. Іванічок Н.Я., Іванічок О.М., Рачій Б.І., Мандзюк В.І. Вплив температури карбонізації на електропровідність вуглецевих матеріалів
3. Zakharchenko S.M., Shydlovska N.A., Perekos A.O. Prospects for plasma-erosion production of nanofluids for thermal, nuclear and heliothermal power engineering
4. S. Polishchuk, I. Korotash, D. Polotskiy, E. Rudenko, Z. Tsybrii. Structure and optical properties of AlN/AlCuFe/AlN sandwich films prepared by helicon-arc ion-plasma method
5. Zasimchuk E., N.Chausov, Baskova O., Turchak T. Effect of structure self-organization of Aluminium alloys D16 and 2024-T3 under impact-oscillatory loading on its fatigue life
6. О. Засимчук, Б. Мордюк, М. Чаусов, А. Котляренко, О. Баскова, В. Засимчук, Т. Турчак, О. Гаценко. Особливості деформаційного зміцнення гетерогенного сплаву алюмінію 2024-T351 з метою збільшення втомної довговічності
7. К.А. Ющенко, Б.О. Задерій, І.С. Гах, Г.В Звягінцева. зварювання монокристалів жароміцних нікелевих сплавів як інновації енергетичних газових турбін
8. Khliyeva O.Ya., Nikulin A.G., Zhelezny V.P., Paskal A.A., Semenyuk Yu.V. thermal conductivity of metal wool armored phase change materials for thermal energy storage

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

9. Прядко Т.В. Вплив тиску на кінетичні параметри процесу взаємодії водню з полікристалічним титаном
10. Шиванюк В.М. Водневі технології: історія, сучасний стан, проблеми, перспективи в Світі та Україні
11. О.П. Рудакова, Ол.Д. Золотаренко, Н.Е.Аханова, А.П. Помиткін, Ан.Д. Золотаренко, Д.В. Щур, М.Т. Габдуллин, М. Султангазіна, Н.А. Гаврилюк, О.Д. Золотаренко, М.В. Чимбай, І.В. Загорулько. Переваги наноматеріалів на основі дірчастого графену
12. О.П. Рудакова, Ол.Д. Золотаренко, Н.Е. Аханова, А.П. Помиткін, Ан.Д. Золотаренко, Д.В. Щур, М.Т. Габдуллин, М. Султангазіна, Н.А. Гаврилюк, О.Д. Золотаренко, М.В. Чимбай, І.В. Загорулько. Графен, легований і модифікований функціональними групами в літій-іонних батареях і суперконденсаторах
13. С.Ю. Максимов, О.М. Берднікова, О.О. Прилипко, Т.О. Алексеєнко, Є. В. Половецький, Ю.А. Шепелюк. Структурні критерії міцності та тріщи-

ності з'єднань при зварюванні під водою під впливом зовнішнього електромагнітного поля

14. Волков Ю.М., Воробйов Є.В., Дроздов О.В., Новогрудський Л.С. Особливості кінетики пластичної деформації метастабільної сталі в інтервалі температур від -269°C до 700°C

15. Hrubiak A.B., Moklyak V.V., Ostafyichuk B.K., Chelyadyn V.L. Electrochemical characteristics of organic lithium battery

16. Є.Г. Лень, Г.Ю. Михайлова, І.Є. Галстян, М.О. Рудь, М.М. Якимчук. Функціоналізація нанокомпозитів для альтернативної енергетики

Інноваційні енергоефективні функціональні матеріали

на основі надпровідних і магнітних структур

17. Belogolovskii M.A. Josephson junctions vs SQUIDS for ultra-sensitive and ultra-effective magnetic field detectors

18. Belogolovskii M.A., Zalutska N.M., Zhitlukhina E.S. Anomalous features in point-spectroscopy data for novel superconducting metals

19. Думік А.О., Шаповалов А.П., Каленюк О.А. Методика вимірів комплексної провідності монокристалічних надпровідників міліметрових розмірів у НВЧ діапазоні

20. Д'яченко О.І., Криворучко В.М., Таренков В.Ю. Нанокомпозити MgB_2 - $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$: андріївські зв'язані стани і ферміони майорана

21. Frolova L. Magnetic and photocatalytic properties Ni-Co -Zn ferrites

22. Каленюк О.А., Шаповалов А.П., Шатернік В.Є., Футимський С.І. Нелінійні характеристики MoRe резонатора

23. Krivoruchko V.N. Unconventional superconductivity of superconductor — half-metallic manganite nanostructures: from spintronics to majorana-like quasiparticles

24. Мартиненко І.О., Шаповалов А.П., Каленюк О.А. Характеризація HEMT транзисторів для подальшого їх застосування у кріогенних підсилювачах надпровідних квантових систем

25. Boliasova O.O., Shapovalov A.P., Kalenyuk A.A., Belogolovskii M.A. Identifying key factors of enhancing superconducting critical temperature in molybdenum alloys

26. V.E. Shaternik, A.P. Shapovalov, A.Yu. Suvorov. Transport characteristics of superconducting MoRe-Si(W)-MoRe junctions under microwave irradiation

27. A.V. Shaternik, T.A. Prikhna, M. Eisterer, V.V. Kovylaev, V.E. Shaternik Transport properties of superconducting magnesium diboride samples

28. Solovjov A. L., Stepanov V. B., Kolesnichenko Yu. A. Comparative analysis of the temperature dependence of resistivity, excess conductivity, pseudogap and thermoelectric power in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ polycrystals

29. Зубов Е.Є. Ефективне самоузгоджене поле в гібридній структурі «феромагнітний метал–надпровідник» з високою бар'єрною прозорістю

Функціональні матеріали для інноваційних
мереж енерготранспортування

30. Дехтяренко В.А., Саввакін Д.Г., Бондарчук В.І., Шиванюк В.М., Прядко Т.В., Стасюк О.О. Воднева енергетика: проблеми та перспективи
31. Ан.Д. Золотаренко, Ол.Д. Золотаренко, Н.Е.Аханова, О.Ф. Савенко, Д.В. Щур, М.Т. Габдуллин, М. Султангазіна, Н.А. Гаврилюк, О.П. Рудакова, О.Д. Золотаренко, М.В. Чимбай, І.В. Загорулько. Дюралюмінієвий накопичувач водню

Інноваційні функціональні наноматеріали

32. Ievtushenko A., Karpyna V., Shtepliuk I., Khyzhun O., Bykov O., Olifan O., Mamykin S., Kolomys O., Strelchuk V., Lytvyn P., Tkach V., Garashchenko V., Baturin V., Karpenko O., Koval V., Dusheiko M. Materials science growth aspects of high-quality oxide thin films for photovoltaics
33. Остафійчук Б.К., Кайкан Л.С., Мазуренко Ю.С. Вплив способу приготування і заміщення іонами алюмінію на структуру та магнітні властивості літій-залізних феритів
34. V. Kotsyubynsky, B. Rachiy, V. Boychuk, I. Budzulyak, M. Hodlevska, A. Kachmar. Aqueous supercapacitors based on nitrogen-doped microporous carbon derived from hemp hurd
35. Kruhlov I.O., Orlov A.K., Prikhodko S.V., Voloshko S.M. Multi layered thin-film metal contacts for new generation solar cells
36. Н.А. Гаврилюк, Г.П. Приходько, М.Т. Картель, Ол.Д. Золотаренко, Н.Е.Аханова, Д.В. Щур, М.Т. Габдуллин, І.В. Загорулько, О.П. Рудакова, М.Султангазіна, А.Д. Золотаренко, О.Д.Золотаренко. Оксид графену - новий вуглецевий матеріал
37. Kruhlov I.O., Orlov A.K., Voloshko S.M. Low-temperature formation of nanosized thin-film materials with shape memory effect for modern microelectromechanical systems.
38. Sichkar T.H., Rokytskyi M.O., Rokytska H.V., Ursul K.V., Shut M.I. P PCTFE - TEG and PHTFE - TEG/SiO₂ nanocomposites
39. V.P. Solntsev, V.A. Nazarenko, T.A. Solntseva, K.N. Petrash M.A. Vasilkovskaya, Y.F. Lugovskoy. Nano-dispersion-strengthened nickel superalloys with directional intermetallic inclusions.
40. Раранський М.Д., Олійнич-Лісюк А.В., Ташук Р.Ю., Ташук О.Ю. Про можливий механізм релаксації руйнівних напружень у частково ауксетичних матеріалах
41. Л.О. Воронцова, Л.М. Яценко, В.І. Штомпель, Н.В. Бабкіна, Н.В. Ярова. Ті-вмісний епоксиретан як захисне оптично прозоре покриття з ефективним блокуванням ультрафіолетового випромінювання
42. Н.А. Гаврилюк, Г.П. Приходько, М.Т. Картель, Ол.Д. Золотаренко, Н.Е.Аханова, Д.В. Щур, М.Т. Габдуллин, І.В. Загорулько, О.П. Рудакова,

М.Султангазіна, А.Д. Золотаренко, О.Д. Золотаренко. Оксид графену - новий вуглецевий матеріал

43. О. Засимчук, В. Засимчук, Т. Турчак. Самоорганізація вакансійних дефектів в енергетичному полі

44. Г.Ю. Михайлова, Є.Г. Ленъ, І.Є. Галстян, М.М. Якимчук, М.М. Шевченко, О.Ю. Герасимов, М.О. Рудь. Електропровідність нанокompозитів на основі вуглецевих нанотрубок

45. Л. Демченко, А. Тітенко, Т. Биканов, О. Тітенко, М. Бабанли, С. Гусейнов. Роль наночастинок, утворених при старінні сплавів заліза і міді, на ефекти пам'яті форми і надпружності

Нові методи дослідження та атестації матеріалів інноваційної енергетики

46. Zhelezny V.P., Ivchenko D.A., Hlek Ya.O., Khanchych K.Yu. Methods for predicting the heat capacity of technically important liquids

47. Paskal A.A., Hlek Ya.O., Diachenko I.A., Khliyeva O.Ya., Zhelezny V.P. Experimental setup for measuring the melting enthalpy of paraffin/nanoparticles phase change materials

48. V.V. Kislyuk, V.M. Shyvaniuk, V.V. Trachevskij, Yu.O. Polushkin and S.O. Kotrechko. Novel approach to analysis of PV encapsulant material properties

49. Васильєв М.О., Ленъ Є.Г., Макеєва І.М., Колесник В.М., Патока В.І., Шевченко М.Я., Смольник С.В. Плазмонна спектроскопія різних станів поверхні монокристалів W(110)

50. Ющенко К.А., Яровицин О.В., Черв'яков М.О., Волосатов І.Р., Хрущов Г.Д., Пестов В.А., Наконечний О.О., Микитчик А.В., Чигилейчик С.Л., Кондрачук С.Є., Желєзняк Н.П. Особливості раціонального вибору присадних порошків жаростійких сплавів на нікелевій та кобальтовій основі для дугового 3D-наплавлення

Теоретичні та чисельні методи фізичного та хімічного матеріалознавства у сфері енергетики

51. Харченко Д.О., Харченко В.О., Щокотова О.М., Купрієнко В.В., Баштова А.І., Лисенко О.Б., Кохан С.В. Моделювання еволюції дефектної структури при нейтронному опроміненні сплавів Zr-Nb

52. A. Timoshevskii, Yu. Matviychuk, G. Gerstein, H. Jurgen Maier. Modeling of B2- and L10-type local short-range order in the Ni-Al system

53. Len V. E., Semenov A. A. Non-universal optical quantum computing with continuous wave detection

54. Штанов Ю. В., Павлюк М. В. Магнітогенез з кінетичним зв'язком

55. M. Byelova, A. Semenov. Boson sampling with realistic detectors

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

56. Monastyrsky G.E., Gilchuk A.V. “Core-shell” Ti-Ni-based nano-particles produced by spark erosion method and their possible energy conversion and sustainability applications

Проблеми та перспективи утилізації тепла

57. Khliiev N.O., Nikulin A. Feasibility estimation of new schematic solution of hybrid photovoltaic/thermal collector with direct solar energy absorption

58. Paskal O.A., Ivchenko D.O., Khliyeva O.Ya., Zhelezny V.P. Influence of the fullerene C₆₀ in paraffin wax on tran-sient heat transfer in thermal energy storage capsule

ВИКОРИСТАННЯ АЛЮМІНІЄВОГО СПЛАВУ У НОВІТНІХ ЯДЕРНИХ УСТАНОВКАХ

Білодід Є.І., Кухоцький О.В.

*Державний науково-технічний центр з ядерної та радіаційної безпеки
03142, Київ, Україна, вул. Василя Стуса, 35-37
Тел.: +38 044 422-49-55 E-mail: ei_beloded@sstc.ua*

Розвиток енергетики, зокрема ядерної, супроводжується винаходами нових матеріалів, нових процесів обробки матеріалів. Але інколи складається так, що матеріали, сплави, які добре себе зарекомендували майже століття тому, знаходять «друге дихання» у сучасних проектах та новітніх ядерних установках.

Стаття присвячена добре відомому і широко поширеному у дослідницьких ядерних установках алюмінієвому сплаву САВ-1. З середини ХХ століття з цього сплаву виготовлялись елементи корпусів дослідницьких ядерних реакторів і інших дослідницьких установок; елементи каналів, трубопроводів, тепловиділяючих елементів (твелів) та тепловиділяючих збірок (ТВЗ) ядерних установок.

Після інтенсивного будівництва дослідницьких установок у СРСР в 50-70х роках минулого століття, у пізніші часи в основному добудовувались старі проекти, а використання сплаву САВ-1 було обмежено виробництвом елементів ТВЗ для постачання ядерного палива на дослідницькі реактори країн, що були у складі СРСР та Східного блоку. Проте, на початку 2000х у Національному науковому центрі «Харківський фізико-технічний інститут» (ННЦ ХФТІ) виникла ідея використання наявного прискорювача електронів у новітній ядерній дослідницькій установці - підкритичній збірці, яка керується лінійним прискорювачем електронів. Ядерна підкритична установка (ЯПУ) ННЦ ХФТІ є унікальною інноваційною установкою за технічними характеристиками та використаними матеріалами. Проектування та виробництво установки стали результатом використання сучасних підходів та матеріалів шляхом поєднання досвіду спеціалістів багатьох підприємств декількох країн. Серед іншого, при роботі над проектом ЯПУ стали у нагоді досвід використання, досліджені міцнісні, нейтронно-фізичні і активаційні характеристики алюмінієвого сплаву та технологія виготовлення виробів з нього.

Алюмінієвий сплав САВ-1 є основним конструкційним матеріалом елементів активної зони ЯПУ. З нього зроблені, зокрема, корпус та днище баку, опорна плита, корпус нейтронно-утворюючої мішені (НУМ), елементи перевантажувальної машини, головки і хвостовики імітаторів ТВЗ та інших елементів активної зони, а також облицювання басейнів зберігання ВТВЗ та відпрацьованих мішеней. Активна зона ЯПУ «Джерело нейтронів» набирається з ТВЗ типу ВВР-М2, основним конструкційним матеріалом якої є також алюмінієвий сплав.

Експлуатаційні параметри установки добре підходять для використання у якості конструкційного матеріалу сплав САВ-1. Температура експлуатації елементів ЯПУ зі сплаву САВ-1 є досить низькою, що забезпечує відсутність їх окрихчення під час експлуатації. Високі експлуатаційні і ресурсні характеристики САВ-1 під дією опромінення, характерного для ядерних дослідницьких установок, підтверджені багаторічним практичним досвідом використання на реакторах ВВР-М.

ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ КАРБОНІЗАЦІЇ НА ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ ВУГЛЕЦЕВИХ МАТЕРІАЛІВ

Іванічок Н.Я., Іванічок О.М.*, Рачій Б.І., Мандзюк В.І.

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

**Тел.: +38 095 493 9423 E-mail: iomm@ukr.net*

Одним із важливих критеріїв відбору електродних матеріалів є їх електропровідність. У цьому випадку до уваги береться як характеристика самого електродного матеріалу, так і електрода в цілому, коли мова йде про композиційні електроди, що складаються з декількох форм вуглецю, електропровідної добавки та зв'язуючого компоненту [1]. Об'єктами дослідження слугували вуглецеві нанопористі матеріали (ВНМ), отримані карбонізацією рослинної біомаси (оболонки плодів волоських горіхів) в діапазоні температур 400-1000°C.

Для вивчення температурних залежностей електропровідності ВНМ використовували метод імпедансної спектроскопії. Дослідження проводились за допомогою комплексу AUTOLAB PGSTAT100/FRA-2 фірми "ECO CHEMIE" (Нідерланди). Розрахунки значень питомих опорів та повної питомої електропровідності (σ^*) матеріалів здійснювалися згідно методики, запропонованої авторами [2]. Її суть полягає в екстраполяції лінійної ділянки частотної залежності повної електропровідності до її перетину з віссю σ^* , що дає можливість визначити значення питомої електропровідності матеріалу.

Як показали результати досліджень, величина повної електропровідності ВНМ залежить від опору окремих частинок, їх розмірів і кількості, пористості матеріалу і хімічного складу поверхні. За невисоких температур карбонізації ($t \leq 700^\circ\text{C}$) величина питомої електропровідності не перевищує $1,1 \text{ Ом}^{-1}\cdot\text{м}^{-1}$ (рис. 1), оскільки за таких умов не відбувається інтенсивного розкладання органічної основи вихідної сировини та її повне вигорання, як наслідок формування складного каркасу ВНМ є незавершеним [1]. Збільшення температури карбонізації вихідної сировини призводить до зменшення питомого опору ВНМ більше ніж на 8 порядків та зростання електропровідності матеріалу, максимальне значення якої $210 \text{ Ом}^{-1}\cdot\text{м}^{-1}$ досягається за температури 1000°C.

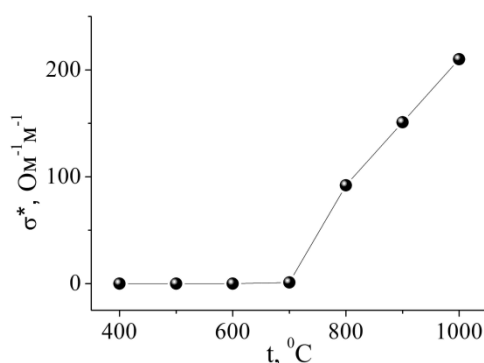


Рис. 1. Залежність повної електропровідності ВНМ від температури карбонізації.

1. М. М. Kuzyshyn, В. К. Ostafiychuk, І. М. Budzulyak, В. І. Rachiy, R. V. Ilnytsky, L. O. Moroz, *Physics and Chemistry of Solid State*, **15**, No. 3: 497 (2014) (in Ukrainian).
2. М. Н. Abdullah, A. N. Yusoff, *Journal of Alloys and Compounds*, **233**, No. 1-2: 129 (1996).

PROSPECTS FOR PLASMA-EROSION PRODUCTION OF NANOFLUIDS FOR THERMAL, NUCLEAR AND HELIOTHERMAL POWER ENGINEERING

Zakharchenko S.M.¹, Shydlovska N.A.¹, Perekos A.O.^{2(*)}

¹*Institute of Electrodynamics National Academy of Sciences of Ukraine, 56
Pr. Peremohy, UA-03057 Kyiv, Ukraine*

²*G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics National Academy of Sciences of
Ukraine, 36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine,*

**Tel.: +38 044 424 3210 E-mail: perekos@ukr.net*

From the numerous scientific works of scientists from the United States, Europe, Japan and other industrialized countries, as well as representatives of scientific schools of academicians of the National Academy of Sciences of Ukraine A.A. Halatov, A.A. Dolinsky and B.I. Bondarenko follows that nanofluids with an aqueous dispersion medium have significantly higher values of thermal conductivity, heat transfer, and critical heat flux compared with distilled water. Such their properties significantly improve convective heat transfer in thermal, heliothermal and nuclear energy units, increasing the efficiency of their operation.

One of the factors holding back the widespread use of nanofluids in energy is their high cost, caused by insufficient development of high-performance and high technological methods of their production. Plasma-erosion production of nanodispersed particles of metals and alloys in water is a further development of the spark-erosion method. Both of those methods are single-stage, high technological, environmental friendly, highly productive and provide low production costs.

Unlike the spark-erosion method, the plasma-erosion method characterized by tens to hundreds of times less energy and duration of discharge pulses in a layer of metal granules immersed in water, which stops the evolution of most plasma channels between them in the prespark stage of the streamer or leader. This provides a significant reduction in the proportion of micro-sized erosion particles and narrowing their size distribution in the range of tens to hundreds of nanometers. Such dimensions of the dispersed phase provide aggregative and sedimentation stability of nanofluids based on metal and their oxides hydrosols up to 6 months without addition of special stabilizers.

The reverse side of reducing the energy of discharge pulses is to reduce the productivity of plasma-erosion particles. To retention it necessary to increase the repetition frequency of discharge pulses in proportion to the decrease their energy. At the present stage of development of power electronics, this is achieved by using in the discharge circuit high-frequency fully controlled bipolar transistors with isolated gate and quasi-resonant modes of their operation.

STRUCTURE AND OPTICAL PROPERTIES OF ALN/ALCUFE/ALN SANDWICH FILMS PREPARED BY HELICON-ARC ION-PLASMA METHOD

S. Polishchuk, I. Korotash, D. Polotskiy, E. Rudenko, Z. Tsybrii*

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

**V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 41, pr. Nauky,
03028 Kyiv, Ukraine*

Solar selective absorbers for thermal energy applications can be prepared using films of quasicrystalline AlCuFe alloys which exhibit high solar absorptance and low thermal emittance. The absorbers layers were deposited onto a silicon substrate using the helicon-arc ion-plasma method. Moreover, AlN layers were used as dielectric anti-reflective coatings, which are necessary for the required optical properties. Optical properties of the deposited AlN/AlCuFe/AlN heterostructures were investigated in the wavelength range of 0.4-25 μm . The initial amorphous-crystalline structure of the Al-Cu-Fe layer was transformed into quasicrystalline one through post-processing annealing. The effect of various processing parameters on the structure and optical properties of the deposited sandwich films is considered. Prerequisites to achieve optimal structure and properties of the heterostructures were found.

Keywords: thin films; quasicrystal; aluminum nitride; reflectance; helicon-arc ion-plasma method

EFFECT OF STRUCTURE SELF-ORGANIZATION OF ALUMINIUM ALLOYS D16 AND 2024-T3 UNDER IMPACT-OSCILLATORY LOADING ON ITS FATIGUE LIFE

Zasimchuk E.¹, N.Chausov,² Baskova O.¹, Turchak T.^{1(*)}

¹*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ, Україна*

²*Національний університет біоресурсів і природокористування України, Київ, Україна, E-mail: ttv@bigmir.net*

Today it is known in thermodynamic systems far from equilibrium changing in the conditions of action of the external energetic field, in which these systems are located, to contribute to self-organization. The self-organization leads to formation of structure which promotes to deformation process that is MBs and SBs. This structural transformation occurs only in the process of loading. The structure after removal of the load may be subjected to relaxation transformations, especially when destructive methods of structural research are used (for example, TEM) [1]. Deformation structure formation at dynamic load was studied in heterogeneous aircraft alloys hardened by particles of other phases — Al₂Cu (so-called Θ - phase) and CuAl₂Mg (so-called S - phase). It was shown that the fatigue life of alloy 2024-T3 can be increased due to preliminary static deformation with pulsed loading, which leads to a sharp decrease in the concentration of S-phase particles and an increase in the concentration of Θ -phase particles. A statistical quantitative analysis of the TEM image of the alloys at various mechanical treatment indicated, that an increase in the fatigue life of the aviation alloy 2024-T3 is achieved by a preliminary dynamic loading with an impulsive load, which leads to the creation of the most efficient phase composition. Thus, the phase composition of the alloy 2024-T3 during plastic deformation is substantially changed. This is due to the fact that plastic deformation, which occurs far from thermodynamic equilibrium, is accompanied by synergistic structure formation, when dislocation slip becomes impossible. In the multiphase alloy 2024-T3 this occurs at the early stages of plastic deformation. Under these conditions an alternative mechanism of plastic flow is realized, this is due to the self-organization of the structure in the form of channels of a hydrodynamic flow with a liquid-like structure inside. Changing the parameters of the external mechanical field (impulsive loading) contributes to the formation of this structure. This structure, saturated of vacancy defects, contributes to dissolution of particles under any external energy influences. It is must be taken into account when predicting the mechanical stability of heterogeneous alloys important for the technology. The mechanical properties of alloy D16, as in alloy 2024-T3 depend on the concentration of reinforcing phases Θ and S. We have experimentally proved that increasing the load frequency from 15 Hz to 110 Hz and the transition from hard load mode, leads to a slight reduction in the number of cycles to destruction of the alloy. It is also shown that long-term exposure of alloy samples for 6-7 months after shock-vibration load has a positive effect on increasing the fatigue life of the alloy. It was shown that with sudden changes in the external mechanical field (impulsive load) in conditions distant from equilibrium (plastic deformation), a significant softening of the material and an increase in plasticity are observed. This is due to the formation of MBs and SBs, despite the increase in external stress. The study of the internal structure of MBs and SBs showed the localization of vacancy defects in them. It was concluded that the localization of plastic mass transfer in the bands is due to the creation of a liquid-like amorphous structure, which supports the hydrodynamic flow of crystalline material in them. The possibility of channel formation in metals with using analytical calculations and computer simulation [1, and others] is considered and proved. Based on these results, it was concluded that dislocation slip is not the only possible mechanism of plastic deformation of crystalline materials, and plastic form change in an external mechanical field may take place without the participation of dislocations. The main reason for this is that plastic deformation occurs far from thermodynamic equilibrium, where the laws of nonlinear physics work.

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

ОСОБЛИВОСТІ ДЕФОРМАЦІЙНОГО ЗМІЦНЕННЯ ГЕТЕРОГЕННОГО СПЛАВУ АЛЮМІНІЮ 2024-T351 З МЕТОЮ ЗБІЛЬШЕННЯ ВТОМНОЇ ДОВГОВІЧНОСТІ

О.Засимчук^{1(*)}, Б.Мордюк¹, М.Чаусов², А.Котляренко³, О.Баскова¹, В.Засимчук, Т.Турчак¹, О. Гаценко¹

¹Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ, Україна

²Національний університет біоресурсів і природокористування України, Київ, Україна

³Інститут проблем міцності імені Г. С. Писаренка, Київ, Україна, eezas@imp.kiev.ua.

Гетерогенні сплави алюмінію знайшли широке практичне застосування тому що, вироби з них мають порівняно малу вагу при достатньо високій міцності, яка забезпечується присутністю зміцнюючих фаз. Такі властивості важливі в авіаційній галузі, де вирішальною є спроможність матеріалу протистояти втомним навантаженням. Нажаль, намагання багатьох дослідників збільшити втомну довговічність авіаційних сплавів алюмінію шляхом деформаційного впливу на матеріал впродовж багатьох років не мали успіху. Причина цього полягає в тому, що будь-яке збільшення міцності прискорює релаксаційні зміни структури матеріалу, що негативно впливає на втомну довговічність. Нами було застосовано динамічне навантаження з імпульсним підвантаженням (УКН), яке в умовах віддаленості від рівноваги викликає самоорганізацію структури у вигляді каналів гідродинамічної течії. Це сприяє зростанню втомної довговічності при деформації матеріалу впродовж дії імпульсу в інтервалі 2.5 – 5,5% для вивченого нами сплаву 2024-T351 при випробуванні на втому в інтервалі напруг 400–440 МПа. Враховуючи те, що втомні тріщини виникають в приповерхневій ділянці зразків або деталей, був використаний метод ультразвукової ударної обробки (УЗУО), який викликає зміцнення лише в приповерхневій ділянці, та комплексна обробка (УКН + УЗУО). Результат нажаль, був негативний: втомна довговічність при частоті навантаження 15 Гц знизилася у порівнянні з вихідним станом при 410 МПа від 18137 циклів до 16542 цикли, а при 440 МПа – від 22087 циклів у вихідному стані до 15503 циклів після обробки. ТЕМ – дослідження зразків, показало значний розвиток релаксаційного структуроутворення в сплаві після застосованої обробки. Але якщо за рівних умов, застосувати лише метод ультразвукової ударної обробки (УЗУО) без попереднього деформаційного втручання УКН на втомну довговічність сплаву 2024-T351, то в такому випадку при $\sigma_{\max} = 425$ МПа втомна довговічність сплаву 2024-T351 при частоті 15 Гц під впливом УЗУО може зростати від 8882 циклів (найбільша втомна довговічність вихідного сплаву в обраних умовах) до 12456 циклів. Ретельний аналіз причини впливу УКН на втомну довговічність сплаву 2024-T3, ТЕМ-структури сплаву після руйнування при втомному навантаженні зразків з вихідною структурою (кількість циклів до руйнування 17004 циклів) та з структурою після процедури попереднього УКН з деформацією $\varepsilon_{\text{imp}} = 2,95\%$ (кількість циклів до руйнування 28767 циклів) з урахуванням морфологічної різниці Θ - Al_2Cu і S - CuAl_2Mg фаз: Θ - фаза мала вигляд витягнутого в одному напрямку прямокутника, ширина якого залежала від орієнтації по відношенню до площини фольги; S — фаза мала вигляд кулі (або крапки при меншому збільшенні). Проведенні розрахунки кількості відображень обох фаз на 100 – 300 полях зору показали, що попередньо проведена процедура УКН зразків сплаву сприяє зменшенню кількості часток Θ - фази і збільшенню часток S - фази. Тобто, УКН зразків сплаву сприяє зменшенню кількості часток Θ - фази і збільшенню часток S - фази. Цей напрямок впливу УКН, спостерігався і при меншій частоті втомного навантаження [1]. Встановлено, що ефекти збільшення втомної довговічності сплаву за рахунок попереднього ударно-коливального навантаження різної інтенсивності, в першу чергу пов'язані зі зміною фізико-механічних властивостей поверхневих шарів сплаву, головним чином – зі зміною фазового складу. Таким чином, застосована для збільшення втомної довговічності деформаційна обробка повинна не тільки відповідати експериментально підтвердженному режиму, а й не бути складною, тобто не повинна об'єднувати декілька різних режимів, що сприяє релаксаційному структуроутворенню.

1. E. Zasimchuk, L. Markashova, A. Baskova, T. Turchak, N. Chausov, V. Hutsaylyuk, V. Berezin, *J. Mater. Eng. Perform.* 22, No/ 7: 3421 (2013)

ЗВАРЮВАННЯ МОНОКРИСТАЛІВ ЖАРОМІЦНИХ НІКЕЛЕВИХ СПЛАВІВ ЯК ІННОВАЦІЇ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ГАЗОВИХ ТУРБІН

К.А. Ющенко, Б.О. Задерій, І.С. Гах^(*), Г.В Звягінцева

*Інститут Електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України,
вул. Казимира Малевича, 03680, Київ-150, Україна
Тел.: +38 044 2052623 e-mail: gakh@paton.kiev.ua

Робота пов'язана з всезростаючим використанням газових турбін у складі енергетичних установок електростанцій, газоперекачуючих агрегатів силових корабельних двигунів та необхідністю підвищення їх потужності, функціональних параметрів, збільшення термічної та експлуатаційної ефективності, екологічності. Вирішення таких запитів в технічному плані пов'язують з підвищенням температури робочого тіла (газу) на вході до турбіни за рахунок розробки та впровадження нових схем, конструкцій, технологій та матеріалів, зокрема з використанням і вдосконаленням високолегованих жароміцних нікелевих сплавів (ЖНС) з монокристалічною структурою та із застосуванням зварювання.

Виконаний в ІЕЗ ім. Є.О. Патона НАНУ комплекс теоретично-прикладних досліджень дозволив встановити фізичні умови збереження монокристалічної структури при зварюванні монокристалів промислових ЖНС та способи їх реалізації. Запропонована конструкція охолоджуваної зварної робочої лопатки зі складною системою внутрішніх каналів. Окремі елементи лопатки, що вирощені шляхом високоградієнтної спрямованої кристалізації, зварюються між собою. Застосування такої конструкції значно спрощує технологію та здешевлює виготовлення монокристалічних лопаток з оптимальною геометрією охолоджувальних каналів. Зростає ефективність охолодження і можливість підвищення температури газу на вході в турбіну, що відповідає тенденції створення ГТУ потужністю 1000 МВт; температура газу при цьому може досягати 1800 °С.

В ІЕЗ ім. Є.О. Патона НАНУ проводяться роботи по технології створення монокристалічного робочого колеса турбін типу «блінг». Запропонована конструкція, яка складається із окремих елементів (лопаток) відповідної геометрії, отриманих шляхом високоградієнтної спрямованої кристалізації, зварюваних між собою електронним променем. Зона зварного шву при цьому винесена за межі максимальних температурних та механічних навантажень. Ефект досягається за рахунок виключення із конструкції найбільш вразливого і металоємного механічного (замкового) з'єднання лопатки з диском. При розробці конструкції колеса типу «бліск» вирішуються питання принципіальної технології зварювання ЖНС в монокристалічному і полікристалічному поєднанні.

Виконані зварки макетних зразків типу «складена лопатка», «блінг» та «бліск». Результати їх вивчення підтверджують доцільність подальшого розвитку цих інноваційних технологій спільно з розробниками, виробниками та експлуатаційниками газових турбін в плані конструкторської, технологічної доробки та промислового освоєння.

THERMAL CONDUCTIVITY OF METAL WOOL ARMORED PHASE CHANGE MATERIALS FOR THERMAL ENERGY STORAGE

Khliyeva O.Ya.^{1(*)}, Nikulin A.G.², Zhelezny V.P.¹, Paskal A.A.¹, Semenyuk Yu.V.¹

¹*Odessa national academy of food technology, Kanatna str. 112, Odessa, Ukraine*

²*CICenergiGUNE (BRTA), Alava Technology Park, Albert Einstein 48, Vitoria-Gasteiz, Spain*

**Tel.: +38 096 457 09 78, E-mail: khliyev@ukr.net*

New composite phase change materials (PCMs) consisting of paraffin wax (PW) and stearic acid (SA) together with aluminum (Al) or copper (Cu) metal wool with average fiber diameter 30 and 45 μm correspondently, have been considered for thermal energy storage applications. Metal wool armored PCM samples (4 pellets for each PCM type) with diameter 23...25 mm and thickness 3.5...6.0 mm (Fig.1) were prepared for thermal conductivity measurement.



Fig. 1 - Image of samples for thermal conductivity measurement (from left to right): PW, PW+Al, PW+Cu, SA, SA+Al, SA+Cu

The metal wool fraction in PCM samples varied in the range 0.0274...0.0296 $\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$ (0.00930...0.01006 $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$) for PW+Al, 0.0605...0.0906 $\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$ (0.00643 - 0.00992 $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$) for PW+Cu, 0.0214...0.0270 $\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$ (0.00758...0.00960 $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$) for SA+Al, 0.0718...0.0902 $\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$ (0.00809...0.01035 $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$) for SA+Cu.

Thermal conductivity measurements for the samples were performed using a precision devise Hot Disk TPS 2500 S (according to standards ISO 22007-2) with sensor All Kapton ($d=2$ mm) meant for isotropic samples. Instrumental uncertainty does not exceed 5%. Since the prepared composite PCMs have anisotropy of thermal conductivity, the measurements were performed for various combinations of the samples of the same PCM type (two samples for one measurement). The obtained values of thermal conductivity were averaged for each PCM type.

The following values of thermal conductivity were obtained ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}$): 0.256 ± 0.0030 for PW, 0.455 ± 0.034 for PW+Al, 0.328 ± 0.086 for PW+Cu, 0.450 ± 0.063 for SA+Al and 0.419 ± 0.066 for SA+Cu (where magnitude after “ $\pm$ ” is standard deviation σ). An interesting result for industrial expediency was obtained: the lower mass fraction of Al wool in PCM in comparison with the mass fraction of Cu (additionally taking into account lower thermal conductivity and lower cost of Al in comparison with Cu), gives a higher increase in thermal conductivity of PW+Al and SA+Al in comparison with PW+Cu and SA+Cu. The obtained effects are required further study and investigation of long-term composite PCMs stability.

Acknowledgments: National Research Foundation of Ukraine, project No. 2020.02/0125

ВПЛИВ ТИСКУ НА КІНЕТИЧНІ ПАРАМЕТРИ ПРОЦЕСУ ВЗАЄМОДІЇ ВОДНЮ З ПОЛІКРИСТАЛІЧНИМ ТИТАНОМ

Прядко Т.В.

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

Київ-142, бульвар Вернадського, 36, Україна

**Тел.: +38 097 479 3616 E-mail: pryadko@imp.kiev.ua*

Гідриди титану та сплавів на його основі займають одне з чільних місць при використанні у відновлюваній водневій енергетиці. Це зумовлене тим, що титан є основою багатьох конструкційних матеріалів, для яких не виключена можливість роботи у водневому середовищі, та утворює гідриди з великою водневою ємністю, що визначає його, як один з найбільш перспективних матеріалів для використання у якості акумуляторів водню. Основними параметрами, що характеризують гідриди є рівноважні тиск, температура та концентрація водню і їх взаємозв'язок.

Вплив тиску на кінетику поглинання водню полікристалічним титаном вивчено на зразках, одержаних електродуговим переплавом, у режимі нагріву, а також у ізобарно-ізоермічних умовах при тисках ~0.05; 0.1; 0.5; 1.0; 3.9 МПа.

Впродовж 9 годин гідрування при тиску 0.05 і 0.1 МПа та температурі 550-570°C досягти максимальної для титану ємності не вдалось. Екстраполяцією залежності зміни тиску $\Delta(P_{теор}-P_{експ})=f(\tau)$ до значень, які б відповідали $C_H=4$ мас. % ($H/Me \approx 2$), визначено, що процес наводнення необхідно було б продовжити ще на 136 год. при тиску 0.05 МПа, та на 30 год. – при 0.1 МПа.

Суттєве зниження температури початку гідрування (225°C) було зафіксовано при наводнюванні при 1.0 МПа. Але досягнувши $C_H=0.4$ мас. %, поглинання припинилось і тільки при підвищенні температури до 440°C воднева ємність зразка досягла 4.14 мас.%. Аналогічний характер поглинання було встановлено і під час гідрування при 3.9 МПа. Також можна говорити про суттєву різницю у поведінці зразків при охолодженні. При тисках до 0.5 МПа і при зниженні температури зразки продовжували поглинати водень. Після зняття тиску та вилучення зразків з реактору на повітря виявлено незначні втрати водню. Значних втрат зазнали зразки, що були наводненні при 1.0 та 3.9 МПа: ~10 і 15% від поглинутого при охолодженні та ще 15 та 20% при знятті тиску відповідно.

Вирахувавши початкову швидкість поглинання для кожного експерименту, встановлено залежність розчинності водню на початковому етапі від тиску та температури: $\left(\frac{\lg(C_H)[am. \%]}{\sqrt{P[амм.]}} = 1.2488 - \frac{490.7622}{T[K]} \right)$. Пропорційність $C_H \approx \sqrt{P_H}$ свідчить про те, що закон

Сівертса виконується до тисків у 3.9 МПа.

Підсумовуючи усе вищезазначене, можна стверджувати, що гідруванням при тисках ≤ 0.1 МПа та температурах $< 600^\circ\text{C}$ не вдається досягти максимальної концентрації водню (TiH_2) за час, що задовольняв би вимоги промисловості. У той же час, гідрування при тисках ≥ 1.0 МПа дає змогу досягти водневої ємності складу дигідриду за прийнятний час та при низьких температурах. Однак, продукти гідрування не стабільні і втрати водню при знятті температури та тиску можуть бути суттєвими. Отже, у межах досліджених технологічних умов, найкращим для насичення титану та його сплавів є режим проведення гідрування при ~ 0.5 МПа та $\sim 450-500^\circ\text{C}$, який дозволяє отримати стійкі продукти гідрування найбільшої ємності за прийнятний час та за один цикл нагріву.

ВОДНЕВІ ТЕХНОЛОГІЇ: ІСТОРІЯ, СУЧАСНИЙ СТАН, ПРОБЛЕМИ, ПЕРСПЕКТИВИ В СВІТІ ТА УКРАЇНІ

Шиванюк В.М.

*Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
03142, м. Київ, бульвар Академіка Вернадського 36, Україна
Тел.: +38 044 424 6427 E-mail: shyva@imp.kiev.com

Незважаючи на те, що водень та його властивості відомі ще з моменту його відкриття Парацельсом [1] в 15 столітті і він досить широко використовується в різних галузях промисловості, в т.ч. нафтопереробній, металургійній, хімічній, харчовій тощо, лише останні десятиліття цей елемент розглядається як перспективний енергоносіє з точки зору альтернативи традиційним викопним паливам (нафті, кам'яному вугіллю, горючому сланцю, природному газу, його гідратам та торфу) в зв'язку із постійним зростанням споживання енергоносіїв, їх нерівномірного розподілу і низькою екологічністю технологічного ланцюга.

Як показує досвід, використання водню в якості енергоносія має свої переваги та недоліки. Серед переваг варто виокремити його екологічність, найвища питома теплота згоряння серед усіх традиційних енергоносіїв [2], широкий спектр первинних ресурсів і їх розподіл, можливість отримання завдяки відновлювальним джерелам енергії навіть малої потужності та запасання на майбутнє.

Втім, існують деякі фактори, які заважають швидкому розвитку і втіленню водневих технологій в різні сфери життя. По-перше, це високе співвідношення об'ємної ємності водню до вагової; по-друге – його надзвичайну активність та руйнівний вплив на всі конструкційні та функціональні матеріали, що проявляється різними шляхами [3]: окрихчення, розтріскування, роздуття, розшарування, перфорація тощо; по-третє – необхідність розбудови нової або перебудови існуючої інфраструктури під новий енергоносіє, що потребує колосальних фінансових вкладень.

В даній доповіді будуть освітлені деякі факти з історії водневих технологій, їх складові частини, проблеми, сучасний стан водневих технологій в Україні і світі із наведенням прикладів вдалого впровадження, та перспективи використання в майбутньому.

1. <https://uk.wikipedia.org/wiki/Водень>
2. В. І. Саранчук, М. О. Ільяшов, В. В. Ошовський, В. С. Білецький. Хімія і фізика горючих копалин. — Донецьк: Східний видавничий дім, 2008. — 600 с.
3. Колачев Б.А. Водородная хрупкость металлов, - Москва: Металлургия, 1985. – 216

ПЕРЕВАГИ НАНОМАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ДІРЧАСТОГО ГРАФЕНУ

**О.П. Рудакова⁽¹⁾, Ол.Д. Золотаренко⁽²⁾, Н.Е.Аханова^(4,5), А.П. Помиткін⁽¹⁾,
Ан.Д. Золотаренко⁽¹⁾, Д.В. Щур⁽¹⁾, М.Т. Габдуллин⁽⁴⁾, М. Султангазіна⁽⁵⁾,
Н.А. Гаврилюк⁽²⁾, О.Д. Золотаренко⁽¹⁾, М.В. Чимбай⁽¹⁾, І.В. Загорулько⁽³⁾**

⁽¹⁾ Інститут проблем матеріалознавства імені Францевича НАН України,
Вулиця Кржижановського 3, Київ 03142, Україна, A.D.Zolotarenko@gmail.com

⁽²⁾ Інститут хімії поверхні ім. Чуйко НАН України,
Вулиця Генерала Наумова, 17, Київ 03164, Україна, O.D.Zolotarenko@gmail.com

⁽³⁾ Інститут фізики металів імені Курдюмова НАН України,
Вулиця академіка Вернадського 36, Київ 03142, Україна, Zagorylko@ukr.net

⁽⁴⁾ Казахської-британський технічний університет (КБТУ)
д. 71, пр. аль-Фарабі, Алмати, 050040, Казахстан, Nazym@physics.kz

⁽⁵⁾ Національна нанотехнологічна лабораторія, КазНУ ім. Аль-Фарабі
д. 71, пр. аль-Фарабі, Алмати, 050040, Казахстан.

Як відомо, істотними недоліками матеріалів на основі графену є зменшення активних поверхонь, подовження шляху перенесення іонів і повільна кінетика переносу іонів, викликані самопереупаковкою 2D листів під час складання електродів при створенні високоефективних пристроїв накопичення енергії з одночасно максимальною енергією і щільністю потужності, а також тривалим терміном служби.

Унікальні переваги наноматеріалів на основі дірчастого графену (HG) впливають з наявності отворів в базисній площині графену. Дірки не тільки спотворюють геометрію графенових нанолістів, але вони також послаблюють силу Ван-дер-Ваальса між ними. Таким чином, переваги наноматеріалів на основі HG для EES (electrochemical energy storage -EES devices) можуть бути наступні:

- (1) Матеріали на основі HG з великою площею поверхні і великою кількістю активних центрів здатні стимулювати електрохімічні реакції, значно збільшуючи питому щільність енергії.
- (2) Отвори, утворені в листах графена, забезпечують достатню поперечну площу каналів для іонної дифузії, навіть в сильно стислій формі, що призводить до сприятливої кінетики іонів і забезпечує підвищену об'ємну щільність енергії.
- (3) Отвори в наноматеріалах зручні для розміщення різних частинок, що беруть участь в електрохімічних реакціях, і сприяють відмінній циклічній роботі.
- (4) Спотворення геометрії листів графену, викликані утворенням дірок, можуть ефективно полегшити їх перепакування.
- (5) Нанопори наділяють матеріали на основі HG кращою здатністю переносити заряд в порівнянні з матеріалами на основі графену, що дозволяє виготовляти товсті електроди з високою об'ємною густиною енергії / потужності.

Таким чином на відміну від нанолістів на основі графену, наноматеріали на основі HG можуть запропонувати численні конструктивні переваги для пристроїв зберігання електричної енергії EES.

ГРАФЕН, ЛЕГОВАНІЙ І МОДИФІКОВАНИЙ ФУНКЦІОНАЛЬНИМИ ГРУПАМИ В ЛІТІЙ-ІОННИХ БАТАРЕЯХ І СУПЕРКОНДЕНСАТОРАХ

**О.П. Рудакова⁽¹⁾, Ол.Д. Золотаренко⁽²⁾, Н.Е. Аханова^(4,5), А.П. Помиткін⁽¹⁾,
Ан.Д. Золотаренко⁽¹⁾, Д.В. Щур⁽¹⁾, М.Т. Габдуллин⁽⁴⁾, М. Султангазіна⁽⁵⁾,
Н.А. Гаврилюк⁽²⁾, О.Д. Золотаренко⁽¹⁾, М.В. Чимбай⁽¹⁾, І.В. Загорюлько⁽³⁾**

*⁽¹⁾ Інститут проблем матеріалознавства імені Францевича НАН України,
Вулиця Кржижановського 3, Київ 03142, Україна, A.D.Zolotarenko@gmail.com*

*⁽²⁾ Інститут хімії поверхні ім. Чуйко НАН України,
Вулиця Генерала Наумова, 17, Київ 03164, Україна, O.D.Zolotarenko@gmail.com*

*⁽³⁾ Інститут фізики металів імені Курдюмова НАН України,
Вулиця академіка Вернадського 36, Київ 03142, Україна, Zagorylko@ukr.net*

*⁽⁴⁾ Казахської-британський технічний університет (КБТУ)
д. 71, пр. аль-Фарабі, Алмати, 050040, Казахстан, Nazym@physics.kz*

*⁽⁵⁾ Національна нанотехнологічна лабораторія, КазНУ ім. Аль-Фарабі
д. 71, пр. аль-Фарабі, Алмати, 050040, Казахстан.*

При роботі з матеріалами на основі графену однією з найважливіших задач є подолання процесу перепакування (агрегації) листів графена в ході виробництва об'ємних 3D-структур реальних матеріалів, що застосовуються, зокрема, і для створення електродів для суперконденсаторів. Збільшення відстані між листами графена з метою зменшення сил тяжіння Ван-дер-Ваальса, що призводять до їх перепакування, є основою всіх стратегій досягнення цієї мети.

Універсальною стратегією для значного підвищення продуктивності різних систем зберігання енергії, таких як літій-іонні батареї, суперконденсатори і ін. є введення атомів N, O, S, I в ґратку графена (легування) і прищеплення до цієї ґратки різних функціональних хімічних груп (функціоналізація). Така модифікація графена може призводити до появи так званих синергетичних ефектів, завдяки яким в отриманих матеріалах зберігаються переваги вихідного графену і з'являються нові функції і властивості, і тим самим поліпшується ефективність і можливості заряду/розряду, щільність енергії/потужності і термін служби цих систем.

Як показали дослідження, провідність одержуваних матеріалів змінюється з п-типу для азот-легованих графенів на р-тип в разі легування бором. У всіх випадках при легуванні графену досягається велика ступінь легування азотом, в порівнянні з бором. В ґратці легованого бором графену: BC_3 , BC_2O , BCO_2 існують різні конфігурації зв'язків атома бору.

Як і у випадку з легуванням графена азотом, різні конфігурації зв'язків впровадженого атома бору в графені по різному змінюють властивості В-легованого графену. У легованих бором графенах збільшується значення питомої ємності і потужності електродів у порівнянні з нелегованим графеном, а також збільшується опір термічному окисленню легованих бором графенів.

СТРУКТУРНІ КРИТЕРІЇ МІЦНОСТІ ТА ТРІЩИНОСТІЙКОСТІ З'ЄДНАНЬ ПРИ ЗВАРЮВАННІ ПІД ВОДОЮ ПІД ВПЛИВОМ ЗОВНІШНЬОГО ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО ПОЛЯ

С.Ю.Максимов, О.М Берднікова*, О.О.Прилипко, Т.О. Алексєєнко,
Є. В. Половецький, Ю.А.Шепелюк

Інститут електрозварювання ім. Є.О.Патона НАН України

**Тел.: +38 0442052563 E-mail: *omberdnikova@gmail.com*

Особливістю отримання зварних з'єднань під водою є вплив навколишнього водного середовища на процеси плавлення та кристалізації металу. Для інтенсифікації процесів дегазації металу, подрібнення структури, підвищення значень показників міцності і пластичності швів пропонується використовувати зовнішній електромагнітний вплив (ЗЕВ) на розплав зварювальної ванни. Точність моделювання електродинамічних зусиль і переміщень в розплаві ванни істотно залежить від того, наскільки повно враховані особливості електромагнітних і гідродинамічних полів [1, 2]. На основі цього стає можливим визначення оптимальних параметрів ЗЕВ і розрахунки індуктора. При цьому найбільш суттєве значення має детальне вивчення впливу структурно-фазового складу та конкретних параметрів структури, що формуються в металі швів та зони термічного впливу (ЗТВ), на міцність та тріщиностійкість цих з'єднань.

Метою роботи було встановлення закономірностей впливу особливостей структурно-фазового складу металу зварних з'єднань низьколегованої сталі на міцність і тріщиностійкість зварних з'єднань при зварюванні під водою під впливом зовнішнього електромагнітного поля.

Дослідження мікроструктури зварних з'єднань проводили методами світлової мікроскопії, а особливості субструктури та розподіл дислокаційної густини у металі зварних з'єднань вивчали дослідженням тонких фольг методом трансмісійної електронної мікроскопії (ТЕМ, JEM-200СХ фірми JEOL, Японія). Встановлено, що при зварюванні під водою низьколегованої сталі 09Г2С метал зварних швів має феритну структуру за наявності неметалевих включень. У ЗТВ формується бейнітно-феритна структура. При застосуванні ЗЕВ у металі швів та ЗТВ структура подрібнюється при рівномірному рівні мікротвердості та відсутності великих неметалевих включень у наплавленому металі.

Встановлено, що рівномірний розподіл густини дислокацій ($\rho = (1...3) \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$) в металі ЗТВ зварних з'єднань при подрібненні рейкової структури бейніту, формуванні субструктури та наявності наночастинок карбідних фаз, рівномірно розподілених по об'єму нижнього бейніту, забезпечують високий рівень властивостей міцності та тріщиностійкості цих з'єднань. При зварюванні під водою це реалізується при застосуванні ЗЕВ.

1.Петрушенко Е. И., *Электронное моделирование*, №5: 27 (1983).

2. Максимов С.Ю., Прилипко Е.А., Кожухарь В.И., Рыжов Р.Н., *Автомат. Сварка*, №11: 20 (2004).

ОСОБЛИВОСТІ КІНЕТИКИ ПЛАСТИЧНОЇ ДЕФОРМАЦІЇ МЕТАСТАБІЛЬНОЇ СТАЛІ В ІНТЕРВАЛІ ТЕМПЕРАТУР ВІД -269°C ДО 700°C

Волков Ю.М., Воробйов Є.В., Дроздов О.В., Новогрудський Л.С.

*Інститут проблем міцності імені Г.С.Писаренка НАН України
вул.Тимірязєвська 2, 01014 Київ, Україна
Тел. 097 489 14 94 E-mail: volkov@ipp.kiev.ua*

Як відомо, пластична деформація кристалічних тіл на мікрорівні є переривчастою внаслідок специфіки руху дислокацій. Проте, на макрорівні криві деформування переважної більшості металів у звичайних масштабах їх запису є гладкими. Та в умовах глибокого охолодження пластична деформація більшості металів та сплавів втрачає стійкість внаслідок явища низькотемпературної нестабільності і проявляється у вигляді стрибкоподібної деформації.

На відміну від цього, ефект Портевена-Ле Шател'є, який також обумовлює макроскопічну нестійкість пластичної деформації притаманний лише окремим металевим матеріалам в певних температурних умовах. Обидва ефекти проявляються при різних видах деформування і суттєво залежать від умов навантаження, напруженого стану, конструктивно-технологічних чинників, та ін. Зокрема, за даної температури – від швидкості деформування, жорсткості випробувальної машини, наявності концентраторів напружень, попередньої деформації, розмірів зразка тощо.

В обох випадках розвиток пластичної деформації характеризується дискретністю як у часі, так і в об'ємі тіла, що деформується. Стрибки деформації відбуваються з великою швидкістю. Але в основі обох ефектів лежать різні фізичні механізми: це термомеханічна нестабільність, викликана локальними розігрівками в умовах дуже малої теплоємності металу за криогенних температур і деформаційне старіння, як взаємодія рухливих дислокацій з атомами домішок.

Метою даної роботи було визначення характеру різних видів нестабільності пластичної деформації метастабільної сталі 12X18H10T за різних температур і швидкостей деформування при статичному розтязі. Дослідження були проведені на 5-ти кратних зразках діаметром робочої частини 3 мм за температури -269°C та в інтервалі температур від 500°C до 700°C . В доповіді наведені залежності механічних характеристик сталі від температури й швидкості деформування, показано вплив досліджуваних явищ. Зокрема, зазначено, що придусення ефекту нестабільності пластичної деформації за температури -269°C шляхом збільшення швидкості деформування призводить до різкого зменшення сталі, а в залежності від рівня її нагріву в діапазоні температур від 500°C до 700°C характер нестабільності пластичної деформації поступово змінюється.

ELECTROCHEMICAL CHARACTERISTICS OF ORGANIC LITHIUM BATTERY

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

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

*hrubiak0andrii@gmail.com

In work shows a new approach to improving the performance of organic lithium battery by using of simple amino acids and natural polypeptides based on them as an active component of the cathode composition. The cathode composition was prepared by homogenizing the organic component, a conductive additive (Super P) and a solution of PVDF binder (N-methylpyrrolidone) in a mass ratio (20÷77) : (75÷18) : 5 and the following coating on a commercial graphite foil collector with next drying in vacuum. The testing of organic lithium battery were carried out in prototypes of Swagelok type in CR2032 format. Li-foil (500 μm) and 1M LiBF_4 solution in γ -butyrolactone were used as anode and electrolyte.

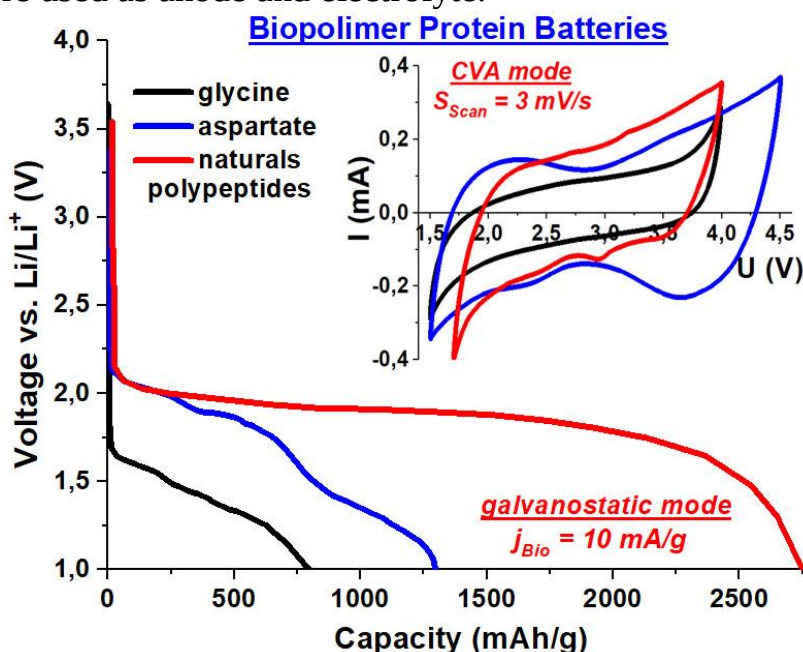


Fig. 1. Discharge profiles and CVA curves (inset) of organic lithium battery with cathodes based on amino acids and natural polipeptides

Discharge profiles of organic lithium batteries at a specific current of 10 mA/g shows different electrochemical activity depending on the type of cathode component (Fig. 1). For organic lithium battery with a cathode based on a natural polypeptides, the discharge profile has S-shaped with the formation of a potential plateau in the range of 2.1-1.8 V. There is a decrease of tension with an insignificant accumulated of charge in the range of 3.5–2.1V. In the range of 1.8-1.5 V there is a change in the slope of the discharge curve, which causes a more rapid decrease of potential. The final specific capacity at 1.0 V about 2750 mA·h/g (in terms of the weight of the biopolymer), which is significantly higher than all available types of cathodes. The discharge profiles of organic lithium batteries with a cathodes based on the amino acids, like aspartate and glycine, have a more inclined shape. For glycine the discharge pro-

file changes the angle of inclination at a lower voltage than is observed for aspartate. The specific capacity of the discharge based on aspartate and glycine up to 1.0V are 1300 mA·h/g and 800 mA·h/g, respectively. Cyclic voltammograms (CVA) of organic lithium batteries shows different appearance, which indicates different mechanisms of current-forming processes at discharge (Fig. 1 - inset). For lithium battery based on the natural polipeptide, the CVA curve has a shape close to rectangular, while maintaining a slight asymmetry. The broadened redox peaks were fixed that indicates on distributions in a wide range of electrochemical reactions with the participation of polypeptides due to a variety of guest positions for lithium ions in their structure and a variable composition of radicals of the main peptide chain. In this case, the highly developed lateral surface of the biopolymer will ensure the occurrence of redox reactions and effective surface adsorption of lithium ions, which ensures the high final specific capacity of the discharge. In the case of CVA curve for lithium battery with aspartate we have a rectangular shape with local inflections of about 3.9V on the discharge part, which, however, does not affect the formation of capacity during discharge in the voltage range of 3.5–2.1 V. For prototype battery with glycine, the CVA curve also has a rectangular form, which corresponding to the capacity accumulation of charge and does not have any redox maxima. The difference in the specific capacity of glycine and aspartate in organic batteries is associated with different mechanisms of surface interactions of compounds with lithium ions at the discharge. Aspartate is characterized by interaction with lithium ions both through a terminal carboxylic group and by the formation of groups (-COOLi) in the radical (-CH₂-COOH), which allows to double the specific discharge capacity compared to glycine, for which characterized by only the course of current-forming interactions at the C-terminal bonds. CVA studies of organic lithium batteries for 100 cycles show predicted perfect cycling capacity with Coulomb efficiency for glycine and aspartate about Q=98%, and polypeptides Q=88%.

ФУНКЦІОНАЛІЗАЦІЯ НАНОКОМПОЗИТІВ ДЛЯ АЛЬТЕРНАТИВНОЇ ЕНЕРГЕТИКИ

Є.Г. Лень, Г.Ю. Михайлова, І.Є. Галстян, М.О. Рудь, М.М. Якимчук

Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України

Україна, 03142, Київ, бульвар Академіка Вернадського, 36

Головним недоліком традиційного термоemisійного перетворення енергії для потреб як наземної, так і космічної енергетики є необхідність нагріву катоду до високих температур, за яких відбувається інтенсивне випаровування навіть тугоплавких металів. Через це ТЕПи з високою густиною потужності та робочими температурами вище 1400°C, досі не знайшли широкого застосування. Високотемпературні джерела тепла є менш технологічними і доступними для використання, ніж низькотемпературні. Тому представляється актуальним розвиток прямих emisійних перетворювачів теплової та променистої енергії в електричну в діапазоні робочих температур 300–600°C. Такі температури можуть бути легко досягнуті при нагріванні матеріалів невеликими концентраторами сонячного випромінювання. Реалізація ідеї прямого перетворення сонячної енергії в електричну emisійним способом за низьких температур може стати реальністю, якщо використовувати в якості катодів метал–нановуглецеві композити.

Досліджено електропровідні властивості системи порошковий Ті–багатошарові вуглецеві нанотрубки (БВНТ) в процесах встановлення між її компонентами електричних контактів за деформації стискання. Спостерігається утворення композитів, яке супроводжується зростанням електропровідності матеріалу більше ніж у 5 разів порівняно з вихідними компонентами при наближенні концентрації БВНТ до 15 мас. %. Цей ефект обумовлено переносом електронів з частинок металу до БВНТ. Показано, що використання композитів метал–вуглецеві наноструктури відкриває шлях до створення «холодних» катодів термоemisійних перетворювачів (ТЕП), які зможуть працювати від низькотемпературних джерел енергії. Катод з композиту Ті–терморозширений графіт (ТРГ) за опромінення ТЕП концентрованим сонячним світлом дозволив вперше спостерігати напругу і постійний струм за температур 170–350°C, що до 9 разів нижчі за робочі температури традиційних ТЕП, виготовлених з тугоплавких металів. При цьому струм спостерігався в замкненому електричному колі без прикладання додаткової зовнішньої різниці потенціалів. Суттєву роль відіграють зміни морфології поверхні композитного зразка під дією концентрованого сонячного випромінювання на етапі попереднього відпалу зразків за температур понад 270–310°C. Під час відпалу на поверхні металевих частинок композиту з його ТРГ-компоненти утворюються вуглецеві наноструктури у вигляді окремо розташованих циліндричних наростів з діаметром 20–80 нм, які можуть забезпечити при подальшій експлуатації катоду суттєве збільшення внеску від автоелектронної emisії, в основі якої лежить незалежний від температури механізм тунелювання. Встановлені механізми генерації струму і напруги у ТЕП з композитним катодом дозволили сформулювати фізичні принципи побудови «холодних» електродів для прямих emisійних перетворювачів концентрованої сонячної енергії в електричну.

JOSEPHSON JUNCTIONS VS SQUIDS FOR ULTRA-SENSITIVE AND ULTRA-EFFECTIVE MAGNETIC FIELD DETECTORS

Belogolovskii M.A.^{1,2}

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

²*Vasyl' Stus Donetsk National University, 21 600-richya Street, UA-21021 Vinnytsia,
Ukraine*

**Tel.: +38 044 424 3432 E-mail: belogolovskii@ukr.net*

Developing a nanoscale magnetic sensing technique applicable to individual molecules or magnetic nanoparticles could enable revolutionary advances in all spheres of life. Unfortunately, in the case of nanoSQUIDS, a transition to the 100 nm scale and below has revealed some challenges difficult to confront. In this case, the SQUID loop may not satisfy the assumption to be thicker than the penetration depth and the critical current of the loop will approach that of the junctions, implying no distinction between a single Josephson device and a dc SQUID with two junctions. If so, it is quite possible to use a single junction as a nanometer-scale ultra-sensitive and ultra-efficient magnetic field detector.

In the talk, I present studies of quantum-matter heterostructures based on a ferromagnet/normal metal (Al/Ni and Al/Ni₈₀Fe₂₀) multilayer proximitized by Nb superconducting electrodes to form a novel Josephson weak-link device highly sensitive to magnetic fields [1,2]. The device is a single Josephson junction, which manifests quasi-sinusoidal critical current oscillations resembling a SQUID response. Another striking feature of our devices involving N/F multilayers is the background Josephson current on which the oscillations are superposed. In general, the background current increases (relative to the amplitude of the oscillations) with the number of NF periods.

I argue that the SQUID-like oscillations in the critical current vs magnetic field dependences arise due to the dephasing accumulated by an electron (or a hole) during its chaotic motion across the weak link. The peculiarity of the (FN)_n multilayers is that the diffusion coefficient for the charge transport perpendicular to the metallic layers is much smaller than being parallel to them. As a result, for a relatively large weak link, the current in the central part of the weak link is *strongly suppressed* relative to the edges. A more precise analysis of the scattering processes shows that the near-edge contribution is exponentially decaying but much weaker than that from the bulk. It leads to the *localization* of the supercurrent to the edges. The background current may appear due to the difference in transmission eigenvalues for two edges of the weak link, leading to the asymmetric Josephson effect.

1. I. P. Nevirkovets, M. A. Belogolovskii, and J. B. Ketterson, *Phys. Rev. Appl.*, **14**, No. 1: 014092 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevApplied.14.014092.

2. I. P. Nevirkovets, M. A. Belogolovskii, O. A. Mukhanov, and J. B. Ketterson, *IEEE Trans. Appl. Supercond.* 31, No. 5: 1800205 (2021). DOI: 10.1109/TASC.2021.3056039.

ANOMALOUS FEATURES IN POINT-SPECTROSCOPY DATA FOR NOVEL SUPERCONDUCTING METALS

Belogolovskii M.A.^{1,2(*)}, **Zalutska N.M.**², **Zhitlukhina E.S.**^{2,3}

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

²*Vasyl' Stus Donetsk National University, 21 600-richya Street, UA-21021 Vinnytsia,
Ukraine*

³*O. O. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering of the N.A.S. of Ukraine,
46 Nauki Avenue, UA-03028 Kyiv, Ukraine*

**Tel.: +38 044 424 3432 E-mail: belogolovskii@ukr.net*

Development of novel superconducting metals with design composition, microstructure, and improving performances is a multidisciplinary topic of high importance for scientists and technologists. In comparison to traditional materials, unconventional superconductors host a rich diversity of phenomena, including pseudogap, d -wave pairing symmetry, or multi-band superconductivity strongly influencing spectroscopic data. In particular, it concerns point-contact experiments, a simple but powerful tool for studying metallic materials. Using this technique, we need to be sure that the main features in detected differential conductance $G(V)$ originate from intrinsic properties of the superconductors. In the contribution, we discuss the physical origins of two most common anomalies in $G(V)$ curves, conductance dips at voltages V slightly exceeding expected gap value and unusually strong peaks at $V = 0$.

We attribute the above-gap conductance dips to an inhomogeneous superconducting state, conditionally divided it into two parts with different gap values and a semitransparent interface between them. For a quantitative description of the conductance dips and their evolution with temperature, we proposed an extension of the conventional theory, the main element of which is a non-equilibrium-driven superconducting-to-normal transition in a sheath formed at the superconductor surface and the following crossover from coherent to sequential charge transmission. Our main conclusions were confirmed by experiments with a NiCu interlayer proximitized to NbN superconductor.

For interpreting anomalous zero-bias peaks, we assume that studied samples have been formed by two junctions in series: a point normal tip -polycrystalline superconductor contact and a Josephson-like device between two grains inside the superconductor. Charge transport in the latter part includes multiple Andreev scattering processes between superconducting electrodes which manifest themselves in the so-called “subharmonic gap structure” with $V^{-1/2}$ behavior at small voltage biases.

Our results provide an important step towards better understanding and engineering of the charge and energy transport across superconducting multilayers using as a building block for superconducting electronics devices.

The study was carried out within the Fundamental Research Programme funded by the Ministry of Education and Science of Ukraine, Project No. 0120U102059.

**МЕТОДИКА ВИМІРІВ КОМПЛЕКСНОЇ ПРОВІДНОСТІ
МОНОКРИСТАЛІЧНИХ НАДПРОВІДНИКІВ МІЛІМЕТРОВИХ
РОЗМІРІВ У НВЧ ДІАПАЗОНІ**

Думік А.О.^{1(*)}, Шаповалов А.П.^{1,2}, Каленюк О.А.^{1,2}

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

²*Київський академічний університет, бульвар Академіка Вернадського, 36,
03142, Київ, Україна*

**Тел.: +38 044 424 1131 E-mail: andreydumik1@gmail.com*

З відкриттям цілих класів нових надпровідників, наприклад пніктидів, виникла задача визначення природи надпровідності у цих сполуках. Значно розширити розуміння надпровідних процесів, що виникають у цих сполуках, дозволяють температурні залежності комплексної провідності $\sigma(T) = \sigma_1 + j\sigma_2$. Розміри монокристалічних надпровідників рідко перевищує 1мм. Експериментальне дослідження комплексної провідності таких невеликих об'єктів є складною науково-технічною задачею. В роботі розглядається методика визначення комплексної провідності за допомогою методу, що базується на використанні високо добротного коаксіального резонатора, у мікрохвильове поле якого внесено надпровідний монокристал. Зі зміни температурних залежностей добротності Q та резонансної частоти F такого комбінованого резонатора можна визначити поверхневий імпеданс $\Delta Z_S = \Delta R_S + j\Delta X_S$ за допомогою виразів $\Delta R_S = \Gamma(\frac{1}{Q(T_0)} - \frac{1}{Q(T)})$ та $\Delta X_S = \frac{2\Gamma}{\omega} \Delta\omega$, де Γ – геометричний фактор, ω – резонансна частота. З використанням виразу $Z_S = \sqrt{\frac{\omega\mu}{\sigma_2} \cdot (\frac{\sigma_1}{2\sigma_2} + j)}$ у наближенні $\sigma_1 \ll \sigma_2$ можна отримати температурну залежність провідності. Для отримання добротності та резонансної частоти резонатора було проведено аналіз амплітудно-частотної характеристики комплексного коефіцієнта відбиття S_{11} методом аналізу графіка Шмідта [1] резонатору з надпровідним зразком. Вимірювання імпедансу міліметрових зразків вимагає застосування електромагнітних полів з частотами >300 ГГц, з довжиною хвилі менше ніж їх розміри. Приведена методика, з використанням високо добротного коаксіального резонатору зі зразком, що знаходиться у пучності мікрохвильового поля, дозволяє отримувати залежності зміни імпедансу монокристалів міліметрових розмірів на частотах ~ 10 ГГц. Робота була проведена в рамках виконання проекту 2020.02 / 0408, що фінансується Національним фондом досліджень України.

**НАНОКОМПОЗИТИ MgB_2 - $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$:
АНДРІЇВСЬКІ ЗВ'ЯЗАНІ СТАНИ І ФЕРМІОНИ МАЙОРАНА**

Д'яченко О.І.¹, Криворучко В.М.²(*), Таренков В.Ю.²

¹*Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
бульвар Акад. Вернадського 36, Київ, Україна*

²*Донецький фізико-технічний інститут ім. О.О. Галкіна НАН України,
пр. Науки, 46, Київ, Україна
E-mail: krivoruc@gmail.com*

Досліджено транспортні і спектроскопічні характеристики композитів надпровідник MgB_2 - манганіт $\text{La}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ (LCMO). Особливістю композиту є те, що MgB_2 це порошок з розмірами гранул 1–5 μm , а LCMO – нанопорошок з розміром частинок 10–30 nm. В процесі виготовлення зразків наночастинки манганіту обгортають мікрочастинки MgB_2 і вже при об'ємної концентрації $\sim 20\%$ розривають перколяційний кластер для MgB_2 . Це дозволяє, змінюючи концентрацію LCMO отримати композит об'ємні транспортні характеристики якого обумовлені проходженням струму по ланцюжкам $\text{LCMO-MgB}_2\text{-LCMO-MgB}_2$. Завдяки ефекту близькості манганіт LCMO переходить у надпровідний стан з триплетною симетрією параметру порядку і надпровідною щільною Δ_{tr} [1]. Також у нанокompозиті можуть сформуватися умови, коли Андріївський зв'язаний стан електрон-дірка трансформується у специфічне топологічне збудження з енергією Фермі - так званий ферміон Майорана. В результаті при напругах $eV < \Delta_{\text{tr}}$ скрізь Андріївський контакт з ферміоном Майорана можуть проходити носії заряду тільки з енергією Фермі. Для носіїв заряду з більшою енергією процес проходження можливо тільки з випромінюванням/поглинанням фононів, $eV = 2\Delta_{\text{tr}} + \hbar\Omega_{\text{ph}}$. Це відображається у провідності контакту відповідними особливостями [2]. В роботі методами контактної спектроскопії вивчалися характеристики провідності контакту композиту з нормальним металом $\text{MgB}_2:(20\%)\text{LCMO} - \text{Ag}$. При $eV \approx 0$ в провідності контакту спостерігався пік, а в області енергій надпровідної щілини $eV < 2\Delta_{\text{tr}}$ проявлялись особливості, наявність яких, з найбільшою вірогідністю, є проявом наявності ферміонів Майорана у нанокompозиті.

Робота підтримана Цільовою програмою фундаментальних досліджень НАН України «Перспективні фундаментальні дослідження та інноваційні розробки наноматеріалів і нанотехнологій для потреб промисловості, охорони здоров'я та сільського господарства» (проект №17/21-Н).

1. V.N. Krivoruchko and V.Yu. Tarenkov, *Phys. Rev. B* **86**, 104502 (2012). DOI:10.1103/PhysRevB.86.104502.

2. N. Dai and Q.-F. Sun, *Phys. Rev. B* **99**, 085436 (2019). DOI:10.1103/PhysRevB.99.085436.

MAGNETIC AND PHOTOCATALYTIC PROPERTIES

Ni-Co -Zn FERRITES

Frolova L.

Ukrainian State University of Chemical Technology, Ukraine

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

Ferrites of such 3d metals as nickel, cobalt, zinc are widely used in modern technologies. In particular, Ni - Zn ferrites are widely used as photocatalysts, in electrical devices, microwave devices, chemical sensors [1]. These materials are popular due to their high resistivity, high Curie temperature, low current loss, etc. On the other hand, cobalt ferrite is a well-known hard magnetic material with high coercive force and moderate saturation magnetization. These properties, along with their high physical and chemical stability, make CoFe_2O_4 nanoparticles suitable for magnetic recording applications such as audio and video recordings, high-density digital discs, photocatalysts. When nickel or zinc is incorporated into the CoFe_2O_4 lattices; it can occupy both octahedral and tetrahedral sites. As a result, the distribution of these cations over the sublattices has a significant effect on the magnetic and photocatalytic properties [2, 3].

In addition, the binary and ternary compositions of ferrites of several metals showed improved magnetic characteristics compared to the individual components. A variety of ferrite production technologies are currently in use. The use of hydrophase chemical synthesis methods is the basis for obtaining ferrites with a given set of properties. The aim of this work is to study the effect of the composition of ferrites on their properties.

The crystal microstructure of the samples was elucidated using X-ray and X-ray diffraction methods. Structural characteristics were determined using X-ray phase and X-ray structural analysis. The magnetic characteristics were determined from the hysteresis loops. EPR spectra were obtained using a Radiopan SE / X-2543 radio spectrometer. To characterize the EPR signals, the signal intensity and signal width, resonance frequency were used. Composition-property diagrams for Co-Mn-Zn ferrites were performed using the simplex method using the STATISTICA 12 program.

It has been found that it is the arrangement of cations along the sublattices and the nature of the bivalent cation that directly determines the magnetic and photocatalytic behavior of spinel ferrites. The highest degree of destruction of 4-nitrophenol was observed for nickel-cobalt ferrites, which is associated with redox potentials. The effect of the mutual influence of the content of various cations on the saturation magnetization and coercive force has been determined. The most influencing factor is the content of cobalt cations. Low values of coercive force for Ni-Zn and Co-Zn ferrites and high values for the whole series of Co-Ni ferrites are established. An increase in the content of cobalt cations leads to an increase in the saturation magnetization for Co-Ni ferrites. The saturation magnetization values are consistent with the values of the magnetic moments of the cations.

1. K. Pubby, S. B. Narang Influence of grain size and porosity on X-band properties of Mn-Zr substituted Ni-Co ferrites. *Materials Letters*, **244**, 2019, 186-191.
2. J. S. Ghodake, T. J Shinde, R. P., Patil, S. B. Patil, S. S. Suryavanshi, Initial permeability of Zn-Ni-Co ferrite. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **378**, 2015, 436-439.
3. K.Thanigai Arul, E. Manikandan, R. Ladchumananandasivam, M.Maaza, (). Novel polyvinyl alcohol polymer based nanostructure with ferrites co-doped with nickel and cobalt ions for magneto-sensor application. *Polymer International*, **65(12)**, 2016, 1482-1485.

НЕЛІНІЙНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ MoRe РЕЗОНАТОРА

Каленюк О.А.¹, Шаповалов А.П.^{1,2}, Шатернік В.Є.¹, Футимський С.І.^{1(*)}

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

²Київський академічний університет, бульвар Академіка Вернадського, 36, 03142, Київ, Україна

*Тел.: +38 044 424 1131 E-mail: futimsky@imp.kiev.ua

Одними з найбільш розповсюджених елементів НВЧ пристроїв є резонатори. Основна частина втрат енергії в мікросмужкових резонаторах відбувається у струмонесучих металевих поверхнях. Зменшити даний вид втрат можна за рахунок використання надпровідних матеріалів на заміну традиційно використовуваним нормальним металом. При виборі надпровідного матеріалу слід враховувати такі характеристики, як значення температури переходу в надпровідний стан T_c , питомий опір матеріалу в нормальному стані ρ_n , що згідно теорії БКШ пов'язані з величиною поверхневого опору R_s . Для стабільності параметрів резонатору, наприклад для використання у метрології, стійкість матеріалу до зовнішнього впливу атмосфери та інших чинників дуже важлива. Одним з таких матеріалів є сплав MoRe (Mo(52%)-Re(48%)), що має високу стійкість до окислення, та при цьому високі значення $T_c=9K$ і низькі значення ρ_n . В даній роботі представлені результати мікрохвильових досліджень надпровідного мікросмужкового резонатора, який було виготовлено з тонких плівок MoRe, причому товщина плівки мікросмужки дорівнювала 100 нм, а плівки «земляної» площини 300 нм. Основним обмежуючим фактором при використанні надпровідних резонаторів є величина потужності вхідного сигналу, який може пропустити через себе резонатор без виникнення гармонічних спотворень. Тому робота присвячена дослідженню амплітудно-частотних характеристик внесених втрат резонатора у діапазоні вхідних потужностей від 23,8 дБм до -16,7 дБм. Виявлено, що збільшення потужності вхідного сигналу призводить до зсуву частоти та спотворення форми резонансної кривої. Аналіз результатів вимірів показав наявність двох ділянок слабкої (пропорційної повному струму I_a в резонаторі) та сильної ($\sim I_a^2$) нелінійностей на залежностях змін поверхневого опору ΔR_s та реактансу ΔX_s . Оскільки одночасно спостерігалось близьке до одиниці значення параметру $r=\Delta X_s/\Delta R_s$, то ділянки зі слабкою нелінійністю можна пов'язати з проникненням магнітного потоку у слабкі зв'язки, а ділянки з сильною нелінійністю – подальшим розігрівом цих слабких зв'язків. Структурні дослідження MoRe плівок, що були проведені з використанням електронної просвічуючої мікроскопії, підтвердили наявність зернистої структури цих матеріалів.

Роботу виконано в рамках теми «Застосування радіаційних технологій для створення новітніх високоефективних матеріалів надпровідникової НВЧ електроніки».

**UNCONVENTIONAL SUPERCONDUCTIVITY OF SUPERCONDUCTOR –
HALF-METALLIC MANGANITE NANOSTRUCTURES:
FROM SPINTRONICS TO MAJORANA-LIKE QUASIPARTICLES**

Krivoruchko V.N.

*Donetsk Institute for Physics and Technology, NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine,
E-mail: krivoruc@gmail.com*

Superconductive spintronics is among the most attractive subjects of spin-electronics. However, superconductors realizing spin-triplet p -wave pairing are not common in nature; Sr_2RuO_4 being the only such candidate, so far. That is why artificial materials demonstrating equal-spin triplet superconductivity have attracted special interest as functional materials for superconductive spintronics. Today, this interest notably increases due to their fundamental attractiveness as promising materials where topological superconducting phase with specific quasiparticle excitations can be realized, and these nanostructures may yield novel technological application, as well.

In this report, we present the results of experimental and theoretical investigations of artificial materials on the base of half-metallic manganites – singlet s - or d -wave superconductors nanostructures, performed in DonPhTI NAN Ukraine. The experimental data obtained give conclusive evidence of long-range superconducting proximity effect and can be qualitatively and quantitatively understood within the scenario of p -wave spin-triplet superconductivity induced in these nanostructures due to the proximity effect [1–7]. The experimental evidence supporting theoretical reasoning that the superconductor–half-metallic manganites nanostructures can be promising artificial materials with topologically nontrivial superconductivity is also produced.

The work is partly supported by the NAS of Ukraine targeted fundamental research program “Promising basic research and innovative development of nanomaterials and nanotechnologies for industry, health and agriculture” (Project No. 17/21-H).

1. V.N. Krivoruchko and V.Yu. Tarenkov, *Phys. Rev. B*, **75**: 214508 (2007). DOI:10.1103/PhysRevB.75.214508.
2. V.N. Krivoruchko and V.Yu. Tarenkov, *Phys. Rev. B*, **78**: 054522 (2008). DOI:10.1103/PhysRevB.78.054522.
3. V.N. Krivoruchko and V.Yu. Tarenkov, *Phys. Rev. B*, **86**: 104502 (2012). DOI:10.1103/PhysRevB.86.104502.
4. V.N. Krivoruchko, A.I. Dyachenko, and V.Y. Tarenkov, *Low Temp. Phys.*, **39**: 211 (2013). <https://doi.org/10.1063/1.4795172>.
5. V.N. Krivoruchko, A.I. D'yachenko, and V.Yu. Tarenkov, *Low Temp. Phys.*, **40**: 1147 (2014).
6. V.N. Krivoruchko and V.Yu. Tarenkov, *Low. Temp. Phys.*, **45**: 476 (2019). <https://doi.org/10.1063/1.5097355>.
7. A. I. D'yachenko, V. Yu. Tarenkov, and V. N. Krivoruchko, *Low. Temp. Phys.* **45**: 1156 (2019). <https://doi.org/10.1063/10.0000047>.

ХАРАКТЕРИЗАЦІЯ НЕМТ ТРАНЗИСТОРІВ ДЛЯ ПОДАЛЬШОГО ЇХ ЗАСТОСУВАННЯ У КРІОГЕННИХ ПІДСИЛЮВАЧАХ НАДПРОВІДНИХ КВАНТОВИХ СИСТЕМ

Мартиненко І.О.^{1(*)}, Шаповалов А.П.^{1,2}, Каленюк О.А.^{1,2}

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

²*Київський академічний університет, бульвар Академіка Вернадського, 36,
03142, Київ, Україна*

*Тел.: +38 044 424 1131 E-mail: igorr4284@gmail.com

Сучасним та перспективним напрямком електроніки є надпровідникові квантові структури, на основі яких можлива побудова швидкої логіки та квантових обчислювальних систем, продуктивність яких значно перевищує сучасні комп'ютери. Різниця енергій між квантовими рівнями таких пристроїв дуже мала. Тому навіть невеликі теплові збудження легко руйнують ці системи. Ця особливість, окрім застосування гранично низьких температур (порядку ~ 10 мК), вимагає також температурної розв'язки зовнішніх вимірювальних приладів, що знаходяться при кімнатній температурі, з низькотемпературною квантовою системою. Для такої розв'язки використовують криогенні підсилювачі. Криогенний підсилювач, крім температурної розв'язки, повинен також підсилювати слабкі сигнали, мати високій вхідний опір та незначне виділення теплової потужності. Сучасні мікросхеми мають граничну температуру роботи -50°C , яка недостатня для побудови криогенних підсилювачів. Тому у якості основного елементу криогенного підсилювача використовують транзистори. Відсутність характеристик транзисторів з малими струмами зсуву при криогенних температурах не дають можливості створювати підсилювачі з оптимальними параметрами. В роботі розглянуто три типи транзисторів - один звичайний кремнієвий, та два НЕМТ (High Electron Mobily Transistor) транзистори із областю двовимірного електронного газу (2DEG), що має високу рухливість електронів. Проведено порівняння вхідних та вихідних вольт-амперних характеристик (ВАХ) транзисторів при кімнатних та криогенних (77К) температурах, з малими вхідними сигналами порядку $0,1 \div 1,0$ мкА, та визначено коефіцієнти підсилення за струмом h_{21E} . Показано падіння підсилення зі зміною температури від $h_{21E}(300\text{K})=330$ до $h_{21E}(77\text{K})=0,6$ звичайного транзистор ВС-547 прп-типу. Для НЕМТ транзистору прп-типу ВР-640, отримані значення підсилення $h_{21E}(300\text{K})=400$, та $h_{21E}(77\text{K})=100$. Вхідний опір збільшився з 350 Ом до 420 Ом. Для третього транзистору прп-типу - НЕМТ ВРР-760 отримано підсилення $h_{21E}(300\text{K})=500$ та $h_{21E}(77\text{K})=707$. Вхідний опір також збільшився від 1000 Ом до 1400 Ом. З вимірюваних ВАХ транзисторів визначено робочі точки для побудови криогенних підсилювачів. Отже, з досліджених транзисторів НЕМТ транзистор ВРР-760 є найбільш перспективним для використання його в якості базового елементу криогенного підсилювача. Ця робота була проведена в рамках виконання проекту № 0121U110046, що фінансується Міністерством освіти і науки України та проекту SPS G5796 рамках Програми «Наука заради миру та безпеки» (SPS) НАТО.

IDENTIFYING KEY FACTORS OF ENHANCING SUPERCONDUCTING CRITICAL TEMPERATURE IN MOLYBDENUM ALLOYS

Boliasova O.O.^{1,2}, Shapovalov A.P.^{1,3(*)}, Kalenyuk A.A.^{1,3}, Belogolovskii M.A.^{1,4}

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

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

³*Kyiv Academic University of the N.A.S. of Ukraine and M.E.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv, Ukraine*

⁴*Vasyl' Stus Donetsk National University, 21 600-richya Street, UA-21021 Vinnytsia,
Ukraine*

**Тел.: +38 044 422 9564 E-mail: shapovalovap@gmail.com*

Discovering the high-temperature superconductivity triggered intensive research and fundamentally altered the basic knowledge of metallic materials at low temperatures. However, even today, after 35 years of comprehensive scientific activities, understanding the superconducting mechanism of complex conducting compounds remains an extremely important challenge. Notably, material complexity makes theoretical modeling difficult, rich physical phenomena do not allow us to distinguish main causes from side ones, and insufficient theoretical methods leave theoretical calculations doubtful. Moreover, the major challenge remains the lack of successfully realistic guiding principles to search for new high- T_c superconductors.

In our opinion, we should look for them by studying more simple metallic systems, in particular, molybdenum-based compounds where alloying can stabilize a relatively high- T_c phase and therefore to create novel superconducting materials. The most direct evidence for the complex electronic structure of a superconductor is the measurement of its energy gaps by junction techniques, tunneling, and point-contact spectroscopies. In this talk, we present and compare our experimental data proving the two-band/two-gap nature of the Mo-Re compounds and propose to apply complementary measurements of current fluctuations to refine the data obtained from the differential conductance spectra. We have developed a unified approach to interpreting findings of the two methodologies, which have been applied to molybdenum-rhenium alloys with predominant and nearly equal Mo content. The second band was shown to entail an additional peak or shoulder in the measured conductance spectra, which can be described by the sum of two weighted single-band curves. Though the model includes seven independent fit parameters, namely, two energy gaps, two barrier scattering strengths, two Dynes parameters for each band, and the contribution of an individual band to the total output characteristic, the values obtained for the two gaps are reliable enough. The study performed may provide clues as to which options will lead to the discovery of new metal compounds with higher T_c 's.

This work was carried out within the framework of the project 2020.02/0408 funded by the National Research Foundation of Ukraine.

TRANSPORT CHARACTERISTICS OF SUPERCONDUCTING MORE-SI(W)-MORE JUNCTIONS UNDER MICROWAVE IRRADIATION

V.E.Shaternik^(*), A.P.Shapovalov, A.Yu. Suvorov

*G.V.Kurdyumov Institute for Metal Physics
Academician Vernadskii blvd. 36, Kyiv, Ukraine*

*[*shaternik@imp.kiev.ua](mailto:shaternik@imp.kiev.ua)*

The method of forming the studied MoRe-Si(W)-MoRe heterostructures with hybrid barriers was implemented on a complex of vacuum equipment based on two vacuum universal posts VUP-5M (produced by SELMI, the former Sumy Electron Microscopes Plant, Sumy). For the deposition of MoRe films by the magnetron method, a molybdenum-rhenium target was made from a foil 0.5 mm thick, which had a composition of 48% Re and 52% Mo. For the deposition of a silicon layer with tungsten nanoclusters, a complex target was used, which consists of a single-crystal silicon wafer and tungsten wires located on it; details of the method for creating heterostructures are given in [1, 2]. The formation of W nanoclusters with a size of about $15 \times 50 \times 50 \text{ nm}^3$ inside a silicon layer with a thickness of about 15 nm and their large size distribution is confirmed by the results of experimental studies of a model Si(W) layer of greater thickness using an electron transmission microscope [1], as well as the results of experimental studies of Si(W) layer using an atomic force microscope [2] in the contactless mode.

The experimentally measured I – V characteristics of Josephson junctions MoRe-Si(W) - MoRe in the presence of external microwave irradiation with a frequency of 18 GHz are shown in Fig. 1; accordingly, the irradiation power here is $P_1 < P_2 < \dots < P_5$.

It was found that with an increase in the power of the applied external microwave radiation on the I–V characteristics of the MoRe-Si(W)-MoRe junctions, characteristic tilted current steps appear, indicating the appearance of phase-slip centers of the superconducting order parameter in the junctions under study. The estimates made within the framework of the Tikhonov-Feigelman theoretical model indicate that in the studied junctions during charge transport, a nonequilibrium occupation of Andreev energy levels in W clusters occurs, as a result of which the admittance of these junctions (response to microwave radiation) changes with a change in the frequency of external electromagnetic microwave radiation in such a way thus, the observed experimental dependence $I_m/I_{m0}(V^2G/V^2_{Gmax})$ changes from the dependence $I_m/I_{m0}(V^2G/V^2_{Gmax}) \approx \text{const}$ at 11 GHz to a dependence with a maximum at 18 GHz.

The work was performed within the framework of the topics ‘Quantum transport in hybrid superconducting nanostructures and ion-plasma condensates and their electromagnetic properties’

1. V. E. Shaternik, A.P. Shapovalov, T.A. Prikhna, O.Y. Suvorov, M.A. Skorik, V.I. Bondarchuk, V.E. Moshchil, *IEEE Trans. on Appl. Supercond.* **27**: 1 (2016). DOI: [10.1109/TASC.2016.2636255](https://doi.org/10.1109/TASC.2016.2636255)
2. V. E. Shaternik, A. P. Shapovalov and O. Yu. Suvorov, *Low Temp. Phys.*, **43**, № 7: 877 (2017). DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4995640>

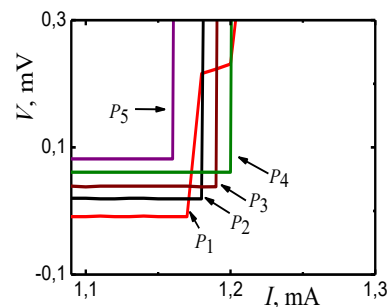


Fig. 1. I- V characteristics of the MoRe-Si (W) -MoRe heterostructure with an nw content of ~ 9 at% and a barrier thickness of 15 nm, which is exposed to microwave radiation with a frequency of 18 GHz at various power levels, curves (1) - (5), respectively, $P_1 < P_2 < \dots < P_5$. To avoid a match curves (1)-(5) are shifted a little.

TRANSPORT PROPERTIES OF SUPERCONDUCTING MAGNESIUM DIBORIDE SAMPLES

A.V. Shaternik¹, T.A. Prikhna¹, M. Eisterer², V.V. Kovylaev³, V.E. Shaternik^{4(*)}

¹V. Bakul Institute for Superhard Materials, Kyiv, Ukraine

²Atominstut Vienna University of Technology, Vienna, Austria

³Institute for Problems of Materials Sciences, Kyiv, Ukraine

⁴G.V.Kurdyumov Institute for Metal Physics, Kyiv, Ukraine

shaternik@imp.kiev.ua

Electrical products from superconducting MgB₂ can be fabricated using relatively cheap and widely used synthesis technologies. In superconducting products synthesized on the basis of high-temperature cuprate superconductors, the factor limiting the critical superconducting current density in them is the barriers that form at the grain boundaries; magnesium diboride is free from this drawback. The features of the implementation of pinning in the fabricated samples of magnesium diboride are discussed in this report. Thin films of magnesium diboride MgB₂ were deposited on sapphire substrates with a size of 8x8x0.2 mm³ and orientation (0001) in an Ar atmosphere at a pressure of about 1 Pa by magnetron sputtering of magnesium diboride MgB₂ targets. Samples of superconducting materials based on MgB₂ were obtained by synthesis at high pressures and temperatures (2 GPa, 600–1050°C) from a stoichiometric mixture of magnesium and boron powders with the addition of alloying additives in an amount of 10 wt%. The superconducting characteristics of the samples under study are shown in Fig.1. To analyze the peculiarities of the pinning of Abrikosov vortices in the samples under study, we plotted the dependence of the pinning force on the applied magnetic field and analyzed them within the framework of the Dew-Hughes model [1]. In the considered case of thin

MgB₂ films, the grain size in them is commensurate with the thickness of the investigated film; as a result, the grain boundaries cross the film through and through, which ensures efficient pinning of Abrikosov vortices at these grain boundaries and, accordingly, a relatively high value of the density of the superconducting critical current in these films. In the case of massive samples with the same grain sizes, the grain boundaries often do not cross the sample through and through, as a result of which the vortices can more easily be depinned from such grain boundaries due to their high elasticity and tendency to stretch, to form loops and, as a result, depinning. This behavior of vortices makes it possible to qualitatively explain the fact that, with approximately the same microstructure, the investigated superconducting thin films of MgB₂ have a relatively large pinning force of Abrikosov vortices and, as a result, an order of magnitude larger J_c than the bulk samples under study.

1. D. Dew-Hughes, *Philos. Mag. B*, 55: 459 (1987).

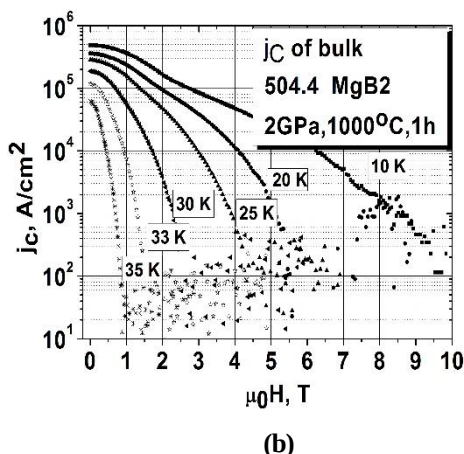
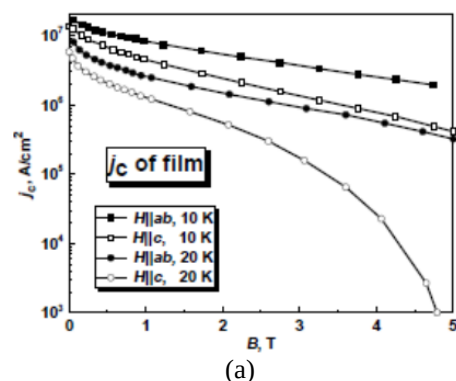


Fig. 1. Dependences of the critical current density, j_c , on the magnetic field B for thin films (a), bulk samples (b).

COMPARATIVE ANALYSIS OF THE TEMPERATURE DEPENDENCE OF RESISTIVITY, EXCESS CONDUCTIVITY, PSEUDOGAP AND THERMOELECTRIC POWER IN $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ POLYCRYSTALS.

Solovjov A. L.^(*), Stepanov V. B., Kolesnichenko Yu. A.

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

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

A correct understanding of the superconducting (SC) pairing mechanism is very important for the search for new compounds that could be superconducting at room temperature. The use of such compounds in industry could significantly reduce energy consumption. A correct understanding of thermoelectric power (TEP) $S(T)$ in high- T_c superconductors (HTSCs) may shed more light on the SC pairing mechanism. But surprisingly, after 35 years since the HTSCs discovery, there is still no consensus on the mechanism that governs the thermoelectric power in these compounds. To clarify the issue, a comparative analysis of the temperature dependence of resistivity $\rho(T)$, excess conductivity $\sigma'(T)$, pseudogap (PG) $\Delta^*(T)$, and $S(T)$, measured on textured $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (YBCO) polycrystals with different charge carrier density n_f , depending on the level of doping with oxygen, modified by annealing, has been carried out. In total three samples were studied: optimally doped (OD) S1 ($T_c = 90$ K), S2 ($T_c = 84$ K) and S3 ($T_c = 80$ K). An increase in $\rho(T)$ as well as some features revealed on $\sigma'(T)$ and $\Delta^*(T)$ indicated an increase in defects in the samples in the course of annealing. Interestingly, no much additional information can be obtained from these results. But the $S(T)$, which was analyzed in two stages, did it. At the first stage, the TEP was analyzed within the framework of ‘Two band model with modified linear T-term’ widely spread in the literature [1]. It was shown that the model describes $S(T)$ well but only above the PG opening temperature $T^* \gg T_c$, at which $S(T)$ sharply changes its slope. The result seems reasonable, since at $T \leq T^*$ the Fermi surface is rearranged. Ultimately, it was shown that in strongly correlated electron systems, such as HTSCs, TEP is of electronic origin: $S/T \sim (C_e/T)(1/n_f e)$, where C_e is the electronic specific heat and e is the charge of the electron [2]. In Ref. [2] it was shown that there are three regimes of S/T vs $\log T$ dependence in HTSCs when the normalized charge carrier density p passes through the quantum critical point (QCP) p^* . In accordance with [2] S1 ($p \approx p^*$) exhibits a perfect, almost flat $\log(1/T)$ dependence from ~ 280 K down to T_c . For S2 ($p \leq p^*$) S/T is nonlinear at high T , but becomes logarithmically divergent below T^* . For S3 ($p < p^*$) S/T is nonlinear in the whole temperature range of interest and undergoes a large increase at low temperature. Thus, our TEP measurements revealed three different regimes of quantum criticality, which suggests that p^* is a QCP, below which some order sets in, causing the reconstruction of the Fermi surface [2].

1. E. Altin, D. M. Gokhfeld, F. Kurt and Z. D. Yakinci, *J Mater Sci: Mater Electron* **24**, 5075 (2013). DOI: 10.1007/s10854-013-1526-2
2. R. Daou, O. Cyr-Choinière, F. Laliberté, et al., *Phys. Rev. B* **79**, 180505(R) (2009) (in English). DOI: 10.1103/PhysRevB.79.180505

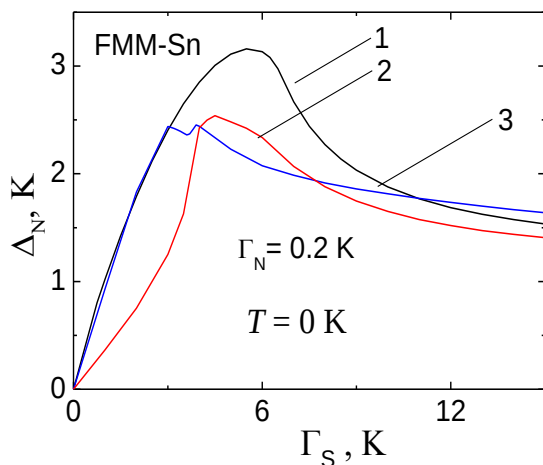
ЕФЕКТИВНЕ САМОУЗГОДЖЕНЕ ПОЛЕ В ГІБРИДНІЙ СТРУКТУРІ «ФЕРОМАГНІТНИЙ МЕТАЛ–НАДПРОВІДНИК» З ВИСОКОЮ БАР'ЄРНОЮ ПРОЗОРІСТЮ

Зубов Е.Є.^(*)

Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
36, бульвар Академіка Вернадського, 03142, Київ, Україна
*Тел.: +38 (044) 424-34-32 E-mail: eezubov@ukr.net

В даній роботі запропонована нелінійна квантовомеханічна теорія ефекту близькості в гібридній структурі «ферромагнітний метал–надпровідник» (ФММ-НП). В нульовому наближенні ефективного самоузгодженого поля [1] отримано вирази для резонансних частот, спонтанної і індукованої щілини НП і ФММ як функції прозорості бар'єру (ПБ) Γ_S і величин обмінної ферромагнітної взаємодії $J(0)$ електронів в металі.

На рисунку представлено залежність індукованої в ФММ щілини Δ_σ при температурі $T = 0$ К з константою електрон-фононної взаємодії $\lambda_N = 0.175$ і частотою Дебая $\omega_D = 423$ К від ПБ $\Gamma_S = |B|^2 \rho_S$ для різних значень $J(0)$, де $\rho_{N,S}$ - густина електронних станів ФММ і НП на рівні Фермі, відповідно, $|B|$ - модуль тунельного матричного елемента. Для надпровідника ПБ $\Gamma_N = |B|^2 \rho_N = 0.2$ К відповідає спонтанній щілині $\Delta = 6.57$ К. При $\Gamma_N = 0$ К маємо $\Delta = 6.6$ К для НП Sn. На рисунку наведено залежності щілини Δ_σ як функції БП Γ_S для $J(0) = 0$ (крива 1) і 6 К (криві 2 і 3 при $\sigma = 1, -1$). Таким чином, зі зростанням ПБ індукована щілина спочатку зростає, а потім насичується при високих значеннях Γ_S . Це означає, що подальше зростання об'єму НП частини гібридної структури вже слабо впливає на ефект близькості. Також на початковій ділянці зростання Δ_σ ФМ обмін пригнічує надпровідність, причому щілини для спінів $\sigma = 1$ і $\sigma = -1$ суттєво відрізняються, що пов'язано з асиметричним обмінним зсувом енергетичних зон електронів з відповідними спінами.



Для надпровідника ПБ $\Gamma_N = |B|^2 \rho_N = 0.2$ К відповідає спонтанній щілині $\Delta = 6.57$ К. При $\Gamma_N = 0$ К маємо $\Delta = 6.6$ К для НП Sn. На рисунку наведено залежності щілини Δ_σ як функції БП Γ_S для $J(0) = 0$ (крива 1) і 6 К (криві 2 і 3 при $\sigma = 1, -1$). Таким чином, зі зростанням ПБ індукована щілина спочатку зростає, а потім насичується при високих значеннях Γ_S . Це означає, що подальше зростання об'єму НП частини гібридної структури вже слабо впливає на ефект близькості. Також на початковій ділянці зростання Δ_σ ФМ обмін пригнічує надпровідність, причому щілини для спінів $\sigma = 1$ і $\sigma = -1$ суттєво відрізняються, що пов'язано з асиметричним обмінним зсувом енергетичних зон електронів з відповідними спінами.

1. E. E. Zubov and E. S. Zhitlukhina, *Effective field approach to transition-metal oxide systems: Magnetism, transport and spectral properties* (Vinnytsia: Vasyl' Stus DonNU: 2019, ISBN 978-966-949-157-2).

ВОДНЕВА ЕНЕРГЕТИКА: ПРОБЛЕМИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ
Дехтяренко В.А., Саввакін Д.Г., Бондарчук В.І., Шиванюк В.М.,
Прядко Т.В., Стасюк О.О.

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

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

Темпи переходу від традиційних джерел енергії до водневої енергетики гальмуються проблемами, які пов'язані з безпечним зберіганням та транспортуванням водню. Здатність водню взаємодіяти практично з усіма матеріалами раніше вважалась прикладом негативного впливу зовнішнього середовища на механічні властивості конструкційних матеріалів, що проявлялось в їх передчасному руйнуванні. Це гальмувало розробку ефективних технологічних рішень в хімічній, енергетичній та інших галузях, спрямованих на використання водню в якості джерела енергії.

Водень є елементом, який характеризується унікальними фізико-хімічними властивостями, і до того ж, широко розповсюдженим у світі. Водень, маючи здатність до швидкої дифузії у твердих тілах і будучи активним по відношенню до більшості матеріалів та сполук, як легувальний елемент має унікальні властивості не тільки розчинятися в кристалічних ґратках та формувати нові фази, але і практично повністю виводитися з матеріалів при зміні термічних та баричних умов. Дані особливості водню покладено в основу багатьох технологій обробки матеріалів з метою керованого впливу на їх структуру, фізичні та механічні характеристики. Здатність водню до оберненої взаємодії з матеріалами (тобто, тимчасово насичувати їх до певних концентрацій і потім легко виходити) було використано як базис при створенні матеріалів-акумуляторів водню, широко відомими представниками яких є тверді сполуки – металеві гідриди. Серед існуючих методів зберігання, на даний час зберігання водню у зв'язаному стані (металеві гідриди) вважається найбільш перспективний. Оскільки даний метод, у порівнянні зі зберіганням у газоподібному та рідкому стані, має найбільшу кількість запасаного водню на одиницю маси контейнера, а також є найбезпечнішим.

Розвиток водневих технологій, в тому числі, застосування водневих джерел енергії у транспортній сфері, постійно потребує нових матеріалів-акумуляторів водню з високою водневою ємністю, м'якими термобаричними умовами та прискореною кінетикою поглинання й виділення газу, що обумовлено необхідністю швидкої перезарядки водневого акумулятора та збільшення часу роботи транспортного засобу на одній зарядці.

Надзвичайно важливою матеріалознавчою задачею є створення нових матеріалів-сорбентів водню з покращеними характеристиками. Враховуючи, що за основними показниками одними з найбільш перспективних таких матеріалів є сплави зі структурою інтерметалідів типу АВ і АВ₂ (фаза Лавеса) та гетерофазні сплави, що складаються з інтерметаліду та співіснуючого з ним ОЦК-твердого розчину, створення таких сплавів на основі титану або удосконалення вже існуючих композицій, потребує визначення загальних вимог до їх хімічного складу та пов'язаних з ним фазово-структурних станів, а також розробки методів впливу на ці матеріали для активації процесів їх взаємодії з воднем з метою керованого покращення водневосорбційних властивостей. Вирішення вказаної проблеми має суттєве наукове значення, одночасно будучи надзвичайно важливим для широкого практичного використання розроблених матеріалів.

ДЮРАЛЮМІНІЄВИЙ НАКОПИЧУВАЧ ВОДНЮ

^[1] **Ан.Д. Золотаренко⁽¹⁾, Ол.Д. Золотаренко⁽²⁾, Н.Е.Аханова^(4,5),
О.Ф. Савенко⁽¹⁾, Д.В. Щур⁽¹⁾, М.Т. Габдуллин⁽⁴⁾, М. Султангазіна⁽⁵⁾,
Н.А. Гаврилюк⁽²⁾, О.П. Рудакова⁽¹⁾, О.Д. Золотаренко⁽¹⁾, М.В. Чимбай⁽¹⁾,
І.В. Загорулько⁽³⁾**

⁽¹⁾ Інститут проблем матеріалознавства імені Францевича НАН України,
Вулиця Кржижановського 3, Київ 03142, Україна, A.D.Zolotarenko@gmail.com

⁽²⁾ Інститут хімії поверхні ім. Чуйко НАН України,
Вулиця Генерала Наумова, 17, Київ 03164, Україна, O.D.Zolotarenko@gmail.com

⁽³⁾ Інститут фізики металів імені Курдюмова НАН України,
Вулиця академіка Вернадського 36, Київ 03142, Україна, Zagorylko@ukr.net

⁽⁴⁾ Казахської-британський технічний університет (КБТУ)
д. 71, пр. аль-Фарабі, Алмати, 050040, Казахстан, Nazym@physics.kz

⁽⁵⁾ Національна нанотехнологічна лабораторія, КазНУ ім. Аль-Фарабі
д. 71, пр. аль-Фарабі, Алмати, 050040, Казахстан.

Для створення діючого накопичувача водню було виготовлено балон високого тиску з дюралюмінію ємністю 45 см³.

Виготовлений балон високого тиску з дюралюмінію має розвинену радіаторну систему, що покращує теплообмін з навколишнім середовищем в процесі експлуатації; балон високого тиску виточений з дюралюмінію, що робить його понад легким (балон важить 70 грамів, порівняно з 240 грамами балону з нержавіючої сталі тієї ж ємності).

Сплав металу гідриду, як носія водню виплавляли у вигляді злитків (маса одного злитка ~100 г). Злитки сплаву подрібнювали, а отриманий порошок (розмір частинок менше 10 мм) завантажували у дюралюмінієвий контейнер накопичувача, й закривали завантажувальний штуцер контейнера. Кількість завантаженого у контейнер матеріалу становила 0,12 кг, що відповідає щільності засипки 3 г/см³.

Матеріал активували безпосередньо у контейнері, нагріванням до 300°C у динамічному вакуумі протягом 1 години, й охолодженням до кімнатної температури та наступним витриманням у водні під тиском 50 бар при циклічному нагріванні до 200°C та охолодженні до кімнатної температури. Після трьохразового повторення останньої операції вимірювали оборотну воднеємність матеріалу ($P_{H_2} = 10...100$ бар; $T = 20...220^\circ\text{C}$), яка склала 122 нсм³/г (4,68 Н/АВ₅), що відповідає ємності накопичувача за воднем 20 літрів.

Висновки: ●Розвинена радіаторна система покращує теплообмін з навколишнім середовищем в процесі експлуатації; ●Накопичувач водню виточений з дюралюмінію, і це робить його понад легким (балон важить 70 грамів, порівняно з 240 грамами балону з нержавіючої сталі тієї ж ємності); ●Манометр крім своєї основної функції виступає, в якості запобіжного клапана, що збільшує рівень безпеки накопичувача водню; ●Дюралюмінієвий балон має вищу теплопровідність, що особливо важливо при процесах гідрування й дегідрування накопичувача водню.

MATERIALS SCIENCE GROWTH ASPECTS OF HIGH-QUALITY OXIDE THIN FILMS FOR PHOTOVOLTAICS

Ievtushenko A.^{1(*)}, Karpyna V.¹, Shtepliuk I.¹, Khyzhun O.¹, Bykov O.¹, Olifan O.¹, Mamykin S.², Kolomys O.², Strelchuk V.², Lytvyn P.², Tkach V.³, Garashchenko V.³, Baturin V.⁴, Karpenko O.⁴, Koval V.⁵, Dusheiko M.⁵

¹*I. Frantsevich Institute for Problems of Material Science, NAS of Ukraine,
3 Krzhizhanovskogo str., 03142, Kyiv, Ukraine*

²*V. Lashkarev Institute of Semiconductor Physic, NAS of Ukraine, 45 Nauky pr.,
03028, Kyiv, Ukraine*

³*V. Bakul Institute for Superhard Materials, NAS of Ukraine, 2 Avtozavodskaya str.,
04074, Kyiv, Ukraine*

⁴*Institute of Applied Physics, NAS of Ukraine, 58 Petropavlovskaya str., 40030, Sumy, Ukraine*

⁵*National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", 37 Prospect
Peremohy, 03056, Kyiv, Ukraine*

**Тел.: +38 044 205 7965, e-mail: a.ievushenko@yahoo.com*

The development of deposition technologies for the growth of optically transparent high-quality oxide thin films opens the doors for their applications as realistic materials for transparent electronics (TE) and photovoltaics (PV). The synthesis of semiconductors with p- and n- type conductivity having a band gap greater than 3.1 eV is an urgent task to create effective TE and PV devices. Zinc oxide is the wide direct band gap ($E_g = 3.3$ eV) n-type semiconductor material which can be used in TE as passive (conductive contacts, resistors) and as active (material for p-n junction) element. However, the achievement of p-type conductivity in ZnO is a main challenge on the way of creating an effective ZnO-based TE and PV devices. Using the p-type NiO ($E_g = 3.5$ eV) or p-type MoO₃ ($E_g = 3.3$ eV) for creating p-n- heterojunction with ZnO is the feasible solution of mentioned above problem. Hence, the development of technology for deposition of quality oxides films for TE and PV is important and actual task of present materials science.

The structure of the all deposited films was investigated using a DRON-4M diffractometer, equipped with a scanning and recording the computer system of the diffraction pattern using the Bragg-Brentano focusing with monochromatic Cu-K α radiation. The elemental analysis were carried out by ZEISS EVO 50 XVP SEM using energy dispersive X-ray spectroscopy (EDX) furnished INCA 450 (OXFORD Instruments). XPS valence-band and core-level spectra were acquired with the UHV-Analysis-System (SPECS, Germany). The sample transmission spectra were recorded on a computerized monochromator LO-MO12 or 4802 UV/VIS double beam spectrophotometer (Unico). A thickness and spectral dependences of the film optical constants were determined by MSE on a setup SE-2100 from SEMILAB. The Raman measurements were carried out in a quasi-backscattering geometry at room temperature using the Horiba Jobin-Yvon T64000 triple spectrometer. PL spectra were excited using a He-Cd laser with the photon energy $h\nu = 3.81$ eV. The surface morphology of deposited films was studied using atomic force microscope (AFM).

Our report is devoted to the investigation of the materials science aspects for the growth of high-quality ZnO, NiO and MoO₃ thin films on Si, SiC and glass wafers by using reactive magnetron sputtering (MS), the reactive ion-beam sputtering (RIBS) and atmospheric pressure metalorganic chemical vapor deposition (APMOCVD) techniques. The research results covered the influences of the key technological parameters and approaches on the characteristics of oxide thin films will be presented and discussed with application of advanced research methods.

ВПЛИВ СПОСОБУ ПРИГОТУВАННЯ І ЗАМІЩЕННЯ ІОНАМИ АЛЮМІНІЮ НА СТРУКТУРУ ТА МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ ЛІТІЙ-ЗАЛІЗНИХ ФЕРИТІВ

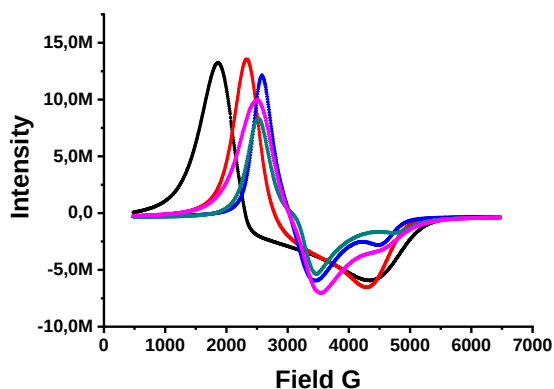
Остафійчук Б.К.¹, Кайкан Л.С.^{1(*)}, Мазуренко Ю.С.²

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

² Івано-Франківський національний медичний університет, вулиця Галицька, 2, Івано-Франківськ, Україна

*Тел.: +38 068 234 8659 E-mail: larysa.kaykan@gmail.com

Алюміній зміщені літєві ферити загального складу $\text{Li}_{0.5}\text{Al}_x\text{Fe}_{2.5-x}\text{O}_4$ ($0.0 \leq x \leq 1.0$) були отримані двома способами: золь-гель автоспалювання і керамічним методом подвійного спікання. Синтезовані матеріали досліджувалися методами Х-променевої дифракції, мессбауерівської спектроскопії, імпедансної спектроскопії в діапазоні частот 0.01 Гц – 5 Гц, які доповнювалися незалежними вимірюваннями за допомогою LCR HI-Tester (HIОКІ 3532-50) [1, 2].



Магнітні властивості синтезованих зразків були отримані на основі кривих перемагнічування і температурних залежностей намагніченості насичення. Структурні та магнітні властивості були доповнені даними ЯМР і ЕПР спектроскопії (рис). Показано, що зразки, отримані хімічним способом володіють вищою однорідністю розподілу елементів за об'ємом, хорошою

повторюваністю результату, високою кристалічністю, малим розміром кристалітів та досконалою стехіометрією. Показано, що магнітні властивості синтезованих систем в основному визначаються розподілом елементів за підґратками шпінелі. Так, присутність немагнітного елементу в октаедричній підґратці зменшує значення намагніченості насичення системи в цілому, і навпаки, заміщення немагнітного елементу в тетрапідґратку збільшує загальну намагніченість системи. Таким чином, селективне зміщення дає можливість впливати на магнітні характеристики шпінельного фериту.

1. Kaykan, L. S., Sijo, A. K., Mazurenko, J. S., & Żywczak, A. *Applied Nanoscience* (2021). DOI: 10.1007/s13204-021-01691-0
2. Kaykan, L., Sijo, A. K., Żywczak, A., Mazurenko, J., & Bandura, K. *Applied Nanoscience*, **10**, No. 12: 4577–4583 (2020). DOI: 10.1007/s13204-020-01413-y.

AQUEOUS SUPERCAPACITORS BASED ON NITROGEN-DOPED MICROPOROUS CARBON DERIVED FROM HEMP HURD

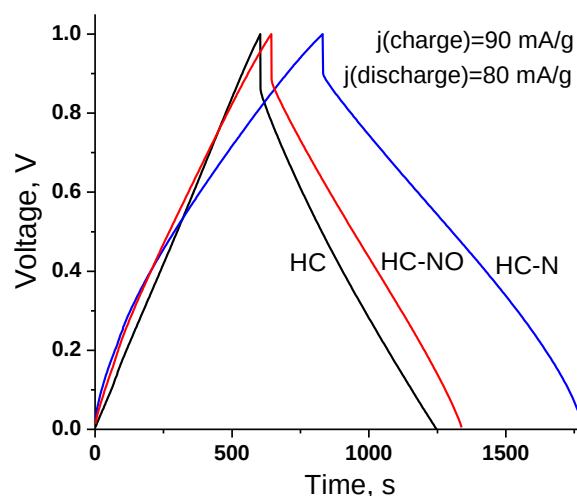
V.Kotsyubynsky, B.Rachiy, V.Boychuk, I.Budzulyak, M.Hodlevska, A.Kachmar

Vasyl Stefanyk Precarpathian National University,
57 Shevchenko str, Ivano-Frankivsk 76018, Ukraine.
Tel.: +38 0973803959 E-mail: kotsyubynsky@gmail.com

The control of morphology and surface properties of activated carbons allow to increase energy and power densities of electrochemical capacitors (EC) with electrical double layer charge accumulation mechanism. Novel methods of carbon preparation, activation and treatment provide a controllable pore size distribution. The formation of nitrogen-containing functional groups on carbon surface causes the increasing of the pore walls wettability in aqueous electrolyte and also promotes pseudocapacitance response through Faradaic reactions.

Activated carbon (HC sample) was prepared from hemp hurd via carbonization at 600°C (correspond to temperature of hemicellulose and cellulose decomposition) and chemical activation. Weight ratio of KOH, carbon and water at activation was 1:1:1; the dried mixture was annealed in argon stream at 900°C. The obtained powders were mixed with HNO₃ as a nitrogen source under the stirring at 70°C in N₂ flow (HC-N sample). The additional thermal treatment of nitrogen-doped carbon was performed at 400°C for 1 hour (HC-NO sample).

The correlation between structural and morphological parameters of obtained carbons and capacitive characteristics of EC has been realized. The nitrogen adsorption / desorption isotherms (77 K) for all obtained samples have H4-type hysteresis loops that correspond to micro- and mesopores presence. The calculated BET specific surface area values are 856, 1105, and 1275 m²/g for HC, HC-N and HC-NO samples, respectively. The calculation of pore size distribution (slit-like pores approximation) was carried out by NLDFT method. The analysis of D and G bands integral intensities ratio of Raman spectra allow to estimate the average sizes of graphite crystallites (in (002) plane) which form the turbostratic carbon. The average lateral size of graphite clusters are about 6.6, 6.0 and 5.9 nm for HC, HC-N and HC-NO samples, respectively. The electrochemical performance was tested using a coin cells (6 M KOH aqueous electrolyte) in galvanostatic charge/ discharge method (Fig.). The values of specific capacitance were 108, 150 and 115 F/g for electrodes based on HC, HC-N and HC-NO carbons at current efficiencies in a range of 95-100 % after 100 cycles. The best performance of HC-N sample is caused by pseudocapacitance and electron-donor properties of nitrogen surface functionalities. The removing of nitrogen-containing groups after annealing of HC-NO sample leads to capacitance decreasing at respectively highest specific surface area.



MULTI LAYERED THIN-FILM METAL CONTACTS FOR NEW GENERATION SOLAR CELLS

Kruhlov I.O.^{1*}, Orlov A.K.¹, Prikhodko S.V.², Voloshko S.M.¹

¹ *National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Kyiv 03056, 37 Peremogy ave., building 9*

² *University of California Los Angeles, 2121K-Engineering 5 420 Westwood Plaza, CA 90095-1595, USA*

**tel.: +38 (044) 204-97-74 e-mail: kruhlov@kpm.kpi.ua*

The constantly grown world's population steadily increases the energy consumption and the alternative energy has the potential to become the least-expensive source of energy. Solar cells' (SCs) technologies are among the most promising trends of alternative energy. One of the key components of any SC device is the metal contacts, which greatly determine their efficiency, stability, and cost.

The thin-film single- and hetero-junction silicon SCs are favorable due of their minimum material utilization and potentially increased efficiencies [1]. There is also a need for the contacts miniaturization in the flexible SCs that recently becomes so popular. However, such SCs are not compatible with traditional contacts manufactured by screen-printing of Ag-based paste and requires a development of a new thin-film contacts. Aiming to decrease the geometrical sizes of contacts, which limits the SCs fill factor, as well as to reduce the high-cost Ag application, an alternative contacts' materials and their fabrication techniques are considered [2]. The utilization of multi-layered thin-film contacts with a Cu conductive layer is a promising approach to reduce both cost and size of the SC device, while maintaining high electrical conductivity.

The long-term stability and corrosion resistance of such multi-layered thin films could be enhanced by applying the post-fabrication ion irradiation. Our recent studies [3] show that irradiation with 400–2000 eV Ar⁺ ions and fluences of 10¹⁶–10¹⁷ ion·cm⁻² allows to modify the structural properties and chemical composition of Ni/Cu/Cr/Si(100) stack. It has been revealed that the low-energy ion bombardment with certain parameters can enhance the film oxidation resistance, as well as decrease the amount of O and C impurities left in the stack after deposition. Furthermore, our latest studies indicated that the application of ion pre-irradiation significantly promotes the adhesion and wear-resistance properties of thin films subjected to annealing in vacuum as compared to the samples after similar heat treatment without pre-irradiation. These findings are of interest in terms of enhancing the long-term properties of metal thin-film contacts for the novel silicon SCs by applying ion beam pre-irradiation.

1. S. Roy, M.S. Baruah, S. Sahu, and B.B. Nayak, *Materials Today: Proceedings* (2021).
2. A. Rehman, and S.H. Lee, Crystalline silicon solar cells with nickel/copper contacts, *Solar Cells- New Approaches and Reviews* (2015).
3. I.O. Kruhlov, I.A. Vladymyrskyi, O. Dubikovskiy, S.I. Sidorenko, T. Ebisu, K. Kato, O. Sakata, T. Ishikawa, Y. Iguchi, G.A. Langer, Z. Erdélyi and S.M. Voloshko, *Materials Research Express*, 6 (2019): 1264313.

КОМПОЗИТИ НА ОСНОВІ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК ТА Al_2O_3 ДЛЯ ДРУКУ 3D-ВИРОБІВ (CJP)

Ол.Д. Золотаренко⁽¹⁾, Н.Е.Аханова^(4,5), О.П. Рудакова⁽²⁾, Ан.Д.Золотаренко⁽²⁾,
Д.В. Щур⁽²⁾, М.Т. Габдуллин⁽⁴⁾, М. Султангазіна⁽⁵⁾, Н.А. Гаврилюк⁽¹⁾,
А.М. Гринько⁽¹⁾, О.Д. Золотаренко⁽²⁾, І.В. Загорулько⁽³⁾, М.С. Нізамєєв⁽³⁾

⁽¹⁾ Інститут хімії поверхні ім. Чуйко НАН України,
Вулиця Генерала Наумова, 17, Київ 03164, Україна, O.D.Zolotarenko@gmail.com

⁽²⁾ Інститут проблем матеріалознавства імені Францевича НАН України,
Вулиця Кржижановського 3, Київ 03142, Україна, A.D.Zolotarenko@gmail.com

⁽³⁾ Інститут фізики металів імені Курдюмова НАН України,
Вулиця академіка Вернадського 36, Київ 03142, Україна, Zagorylko@ukr.net

⁽⁴⁾ Казахської-британський технічний університет (КБТУ)
д. 71, пр. аль-Фарабі, Алмати, 050040, Казахстан, Nazym@physics.kz

⁽⁵⁾ Національна нанотехнологічна лабораторія, КазНУ ім. Аль-Фарабі
д. 71, пр. аль-Фарабі, Алмати, 050040, Казахстан.

Одним з перспективних напрямків матеріалознавства є формування різних композитів, що містять вуглецеві нанотрубки (ВНТ) з метою підвищення їх тепло- і електропровідності, а також хімічної та термічної стабільності, міцності і трибологічних характеристик.

Метою даної роботи було формування 3D-виробів з композитів на основі Al_2O_3 і ВНТ при використанні технології 3D-друку CJP.

Вуглець-керамічні композити були отримані як механічним змішуванням (в планетарному кульовому млині) порошків Al_2O_3 і ВНТ в різних вагових пропорціях (1%, 2%, 3%, 4% і 5% мас. ВНТ), так і синтезом вуглецевих нанотрубок в обсязі порошку Al_2O_3 , що забезпечувало більш рівномірний розподіл трубок в обсязі. Такі вуглець-керамічні композити добре підходять для використання в технології 3D-друку CJP.

При утриманні УНТ 5°мас.% Спостерігалася велика кількість пучків нанотрубок, розподілених між частинками оксиду алюмінію. При низькому вмісті ВНТ (1-2мас.%) в композиті електропровідність практично не змінюється і становить близько 5×10^{-8} Ом/см. Збільшення вмісту ВНТ до 5°мас.% призводить до різкого збільшення електропровідності до 3×10^{-4} Ом/см це більше ніж на 4 порядки, в порівнянні з чистим Al_2O_3 .

Друк 3D-виробів з композиційних матеріалів на основі Al_2O_3 і вуглецевих нанотрубок проходила при використанні технології 3D-друку CJP. Спікання 3D-виробів проводили при температурному інтервалі 700-1800°С.

У таких спечених зразках зафіксовано різкий підйом міцності на вигин в залежності від кількості ВНТ в композиті. Такі матеріали у вигляді 2D- та 3D-виробів знаходять застосування в авіаційній і космічній техніці, хімічному машинобудуванні, а також у створенні індивідуального бронезахисту (бронезилети) і в інших областях.

LOW-TEMPERATURE FORMATION OF NANOSIZED THIN-FILM MATERIALS WITH SHAPE MEMORY EFFECT FOR MODERN MICROELECTROMECHANICAL SYSTEMS

Kruhlov I.O.¹, Orlov A.K.^{1*}, Voloshko S.M.¹

¹ National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Kyiv 03056, 37 Peremogy ave., building 9
*tel.: +38 (044) 204-97-74 e-mail: orlov@kpm.kpi.ua

NiTi alloy thin-film compositions are one of the most well-known representatives of functional materials with shape memory effect. Exceptional chemical resistance, biocompatibility, superelasticity ($\sim 8\%$), very high work output ($\sim 6 \text{ J/m}^3$) determine their high practical potential as functional elements of microelectromechanical systems, as well as in biomedicine, robotics, aerospace and defense industries.

The application of NiTi thin-film materials remains limited, primarily due to the need of annealing at elevated temperatures (above 450°C) in order to form a crystalline austenitic B2-NiTi structure with shape memory, while after deposition the material has an amorphous structure. Performing the high-temperature annealing is undesirable because it is accompanied by significant grain growth, increased surface roughness and the development of oxidation processes. To avoid the stage of high-temperature annealing, the B2-NiTi austenitic phase can be obtained by depositing the film on a heated (usually up to $400\text{--}600^\circ\text{C}$) substrate. However, due to the chemical instability of the substrate, such approach can induce interfacial reactions.

To ensure the low-temperature formation of the austenitic B2-NiTi phase, alternative approaches examined in our previous studies can be proposed: (a) initiation of grain boundary diffusion by increasing the number of internal interfaces and, consequently, enlarging the mechanical stresses in system [1]; (b) acceleration of diffusion processes due to the introduction of additional intermediate layers of Ag and Au alloying elements [2]; (c) increasing the number of crystallization centers of B2-NiTi phase by varying the annealing atmosphere (Ar, N₂, Ar + H₂, N₂ + H₂) [3].

Combination of the proposed approaches allows to obtain an austenitic phase with the shape memory effect based on Ni-Ti at lower heat treatment temperatures, which is of high relevance in terms of preventing the undesired structural changes of the functional elements.

1. Вплив атмосфери відпалу на магнітні властивості нанорозмірних плівок стопу FePt / I.O. Круглов, В.В. Могилко, І.А. Владимирський, Ю.М. Макогон, М.О. Васильєв, С.І. Сидоренко, С.М. Волошко // Металофізика і новітні технології.- 2019.- 41.- 157.
2. Synchrotron analysis of structure transformations in V and V/Ag thin films / A.K. Orlov, I.O. Kruhlov, O.V. Shamis, I.A. Vladymyrskyi, I.E. Kotenko, S.M. Voloshko, S.I. Sidorenko, T. Ebisu, K. Kato, H. Tajiri, O. Sakata, T. Ishikawa // Vacuum. – 2018. – 150. – P. 186-195.
3. Diffusion of Au and its influence on the coercivity of [FePt/Au/FePt]_{2x} thin films during annealing in different atmospheres / A.K. Orlov, O.O. Zhabynska, I.A. Vladymyrskyi, S.M. Voloshko, S.I. Sidoren

PHYSICAL, MECHANICAL AND ELECTRICAL PROPERTIES OF PCTFE - TEG AND PHTFE - TEG/SiO₂ NANOCOMPOSITES

Sichkar T.H., Rokytskyi M.O.^(*), Rokytska H.V., Ursul K.V., Shut M.I.

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

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

This research is devoted to the analysis of the physical, mechanical and electrical properties of the polychlorotrifluoroethylene (PCTFE) - nanodispersed graphite (TEG) and PCTFE - modified TEG systems.

Nanoscale filler was obtained by ultrasonic dispersion of thermally expanded graphite. For the functionalization of carbon nanoplates the dispersed TEG was modified with silicon dioxide (SiO₂) by adding a hydrosol to the mixture of dispersed TEG and ethyl alcohol, followed by ultrasonication and drying.

The method of preliminary determination of the percolation threshold is developed and described. The inversion of the mechanical properties of composites during the transition through the percolation threshold was investigated.

It is established that the modification of the nanofiller increases the intermolecular interaction of the filler-matrix. Depending on the concentration of the filler, the structure of the matrix and the system as a whole demonstrates dynamic transformations in the size of the heterogeneity of the structure.

Ultrasonic studies of composites in the megahertz frequency range have shown that the smallest size of structure inhomogeneity is achieved in the range of concentrations of percolation development, and the change in the size of system structure inhomogeneity is associated with the transition from inhomogeneity as the size of crystallites activated by nanofiller at low concentrations associated with coagulation of nanoparticles at concentrations exceeding the percolation threshold.

Using the two-contact method in the kilohertz frequency range it has been shown that the modification of the surface of conducting carbon nanoplates with ultradispersed dielectric silicon dioxide (SiO₂) (30%) leads to a nontrivial effect - an increase in the electrical conductivity of the PCTFE - 2.5% TEG/30% SiO₂ composite by more than two orders of magnitude in comparison with the PCTFE - TEG composites, containing unmodified carbon nanoplates. Last fact is obviously associated with the manifestation of the relaxation components of the electrical conductivity of the TRG/SiO₂ and PCTFE/SiO₂ interphase layers.

Thus, the offered methods for improving the physical, mechanical and electric properties of PCTFE - TRG and PCTFE-TRG/SiO₂ composites by means of dispersing and modifying the surface of TRG with ultradispersed dielectric - SiO₂ have shown themselves to be effective and make it possible to obtain new high-tech materials for instrumentation and electrical engineering.

NANO-DISPERSION-STRENGTHENED NICKEL SUPERALLOYS WITH DIRECTIONAL INTERMETALLIC INCLUSIONS

V.P.Solntsev, V.A.Nazarenko, T.A.Solntseva, K.N.Petrash,
M.A.Vasilkovskaya, Y.F.Lugovskoy

Ukraine, Frantsevich Institute for Problems of Materials Science

E-mail: SolntcevVP@gmail.com

The traditional technology for obtaining dispersion-hardened alloys is mechanochemical synthesis. The main disadvantages of this method, despite the uniform distribution of the inert hardener, include an increased content of interstitial impurities, a decrease in plasticity and other physical and mechanical properties. When solid-phase sintering, which is used to obtain such materials, the composition retains the effect of the heredity of the powder system, as in the production of any powder materials. The IPM NASU has developed a new technology for the consolidation of powder pressing, based on reaction sintering [1]. It makes it possible to distribute nano-dispersed inclusions uniformly on the crystallite surface. At the same time, due to the high crystallization rate during reaction synthesis, the powder system loses its heredity as such. Thanks to the development of new theoretical concepts within the framework of a synergistic approach and experimental study of the thermokinetics of exothermic reactions [2, 3], reaction sintering has become a controllable technology. A distinctive feature of reaction sintering is a high crystallization rate when the temperature rises due to isothermal heating. It can be indirectly established by the rate of temperature rise during an exothermic flash, which is more than 20,000 K / s. Actually, in this case, the material loses the hereditary structural defects of the powder body, which leads to an increase in plasticity, impact strength and, above all, fatigue strength. This is a consequence of irreversible processes during the reaction of the components. Yttrium oxide is introduced by chemical deposition on the surface of nickel particles.

During reaction crystallization, yttrium oxide nanoparticles do not have time to coagulate and are located in the entire volume of the intermetallic compound, part of which decomposes and passes into a solid solution. During cold rolling, nano-dispersed inclusions of an inert oxide located on the surface of particles of the nickel solid solution line up along the direction of deformation and become initiators of deformation aging. The intermetallic compound is precipitated as fibers with a length-to-cross-section ratio of 10 to 50. The material acquires high technological plasticity. Thus, the degree of reduction without intermediate annealing is sometimes more than 90% and the deformed material under tension has an elongation of 22%. The study of fatigue strength during tests $N = 10^7$ cycles showed that its value is 0.6-0.7 of the yield stress of the material. This is due to the formation of intermetallic fibers during the decomposition of the solid solution. The degree of reduction before the appearance of cracks of the quenched nickel-molybdenum alloy in the concentration range of the equilibrium existence of Ni_3Mo - Ni_4Mo intermetallic compounds was 50%. The effect of increased technological plasticity is apparently due to the specific nature of the directional strain-induced aging. A significant amount of fatigue strength is associated with the fibrous structure of the material.

1. Солнцев В.П. Разработка дисперсно-упрочненного порошкового сплава на основе нихрома и технологии изготовления из него макета металлической теплозащитной конструкции [Текст] / В.П. Солнцев, И.А. Гусарова, Г.А. Фролов и др. // Порошковая металлургия, №11/12. – Київ. – 2018. – С. 23-32.
2. Солнцев В.П. Термокинетика реакционных процессов, инициированных контактным плавлением в порошковых металлических смесях на основе никеля с алюминием / В.П. Солнцев, В.В. Скороход, К.М. Петраш, Т.А. Солнцева // Адгезия расплавов и пайка материалов, 2014.- № 47.- С. 25-34.
3. Солнцев В.П., Теоретические и экспериментальные предпосылки наблюдения элементов самоорганизации в технологии реагирующих порошковых систем / Солнцев В.П., В.В. Скороход В.В. //Порошковая металлургия.- 2012.- № 11/12.- С. 5 17

ПРО МОЖЛИВИЙ МЕХАНІЗМ РЕЛАКСАЦІЇ РУЙНІВНИХ НАПРУЖЕНЬ У ЧАСТКОВО АУКСЕТИЧНИХ МАТЕРІАЛАХ

Раранський М.Д.¹, Олійнич-Лисюк А.В.¹, Ташчук Р.Ю.^{1(*)}, Ташчук О.Ю.²

¹Чернівецький національний університет ім. Юрія Федьковича, Ін-
ститут фізико-технічних і комп'ютерних наук, Коцюбинського, 2,
Чернівці, Україна, 58012

²ВСП Фаховий коледж Чернівецького національного університету імені
Юрія Федьковича, Банкова, 1, Чернівці, Україна, 58000

*Тел.: +38 095 507 4333 E-mail: tashchuk.roman@chnu.edu.ua

Проблема потепління клімату, з одного боку, і дефіцит енергії, з іншого вимагають максимально швидкого впровадження найефективніших видів виробництва відновлюваної енергії (зеленої енергетики). Для виконання цих, без перебільшення, грандіозних проектів необхідні smart-матеріали, які дозволяють максимально ефективно використовувати природні властивості речовини, про які люди донедавна навіть не здогадувались [1]. До таких речовин належать ауксетичні матеріали, що характеризуються суттєво нелінійними механічними властивостями, які значно змінюються при збільшенні дефектності матеріалу, зокрема в процесі утворення нано або мікро контактів з них, нанесених на не-ауксетичні поверхні. На сьогодні складно прогнозувати їх еволюцію в часі в полі механічних напружень через практичну відсутність знань про поведінку дефектів в ауксетичних матеріалах [2]. Ще складнішим стає завдання прогнозування їх поведінки у зовнішніх механічних полях, якщо в них поряд із ауксетичними напрямками з від'ємними значеннями коефіцієнтів Пуассона ν_{ij} є “звичайні напрямки”, в яких $\nu_{ij} > 0$ [2].

В цьому дослідженні представлені результати вивчення поведінки дислокаційних перегинів і дислокаційних атмосфер в частково ауксетичних індії, берилії, діоксиді кремнію та показано, що

- досліджувані дефектні підсистеми в умовах енергетичної або орієнтаційної заборони на їх рух в кристалі можуть переміщатись підбар'єрно;
- зростання ймовірності тунелювання перегинів на дислокаціях в In у напрямках, де $\nu_{ij} \geq 0,5$ дозволяє вважати ці напрями каналами релаксації напружень в цьому металі.

1. М. Раранський, В. Балазюк, М. Гунько. Явище ауксетичності в твердих тілах. Чернівці: Друк Арт, 2016. – С.116 – 121.

2. M. D. Raransky, A. V. Oliynych-Lysyuk, R. Yu Tashchuk, O. Yu. Tashchuk, O. V. Lysyuk. “Peculiarities of Deformation in Crystals of In in a Wide Temperature Range”. *Metallophysics. The Latest Technologies*. 2018, 40: 11: 1453–63. (in Ukrainian) DOI: 10.15407/mfint.40.11.1453 <https://mfint.imp.kiev.ua/ua/abstract/v40/i11/1453.htm>

ТІ-ВМІСНИЙ ЕПОКСИУРЕТАН ЯК ЗАХИСНЕ ОПТИЧНО ПРОЗОРЕ ПОКРИТТЯ З ЕФЕКТИВНИМ БЛОКУВАННЯМ УЛЬТРАФІОЛЕТОВОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

Л.О. Воронцова, Л.М. Ященко, В.І. Штомпель, Н.В. Бабкіна, Н.В. Ярова

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

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

Робота спрямована на розробку прозорих полімерних композитів, здатних захищати матеріали та вироби, особливо ті, що використовуються на відкритому повітрі, від негативної дії ультрафіолетового (УФ) випромінювання, яке впливає на їх ефективний термін експлуатації. Для формування полімерної матриці використано епоксиретанові олігомери (ЕУО). Завдяки сильному УФ-поглинанню аж до видимої області, високій оптичній прозорості та термостабільності як наповнювач привертає увагу TiO_2 . Синтез вихідного та титановмісних ЕУО здійснювали за методикою, описаною в [1]. Титаноксидний наповнювач формували *in situ* золь-гель методом за реакцією гідроліз-конденсація ізопропоксиду титану в середовищі поліоксипропіленгліколю, вміст якого в перерахунку на TiO_2 становив 0,005 та 0,02 мас. %. Зазвичай такий метод приводить до формування аморфного TiO_2 з практично відсутньою фотокаталітичною активністю [2] через наявність дефектів, які прискорюють електронно-діркову рекомбінацію, що сприятиме сповільненню деструктивних змін полімерної матриці після тривалого УФ опромінення. Методом ширококутового розсіяння рентгенівських променів виявлено, що отримані плівки епоксиретану як вихідного (ЕУ), так і титановмісного (Ті-ЕУ) аморфні, оскільки на дифрактограмах відсутні піки, характерні для кристалічних фаз TiO_2 .

Метод спектрофотометрії показав, що в діапазоні видимих довжин хвиль зразки ЕУ по суті прозорі, лише слабо поглинають між (400 і 500) нм, та демонструють ефективне УФ-поглинання до 300 нм, а для Ті-ЕУ характерне зміщення УФ-поглинання до більших довжин хвиль. Після випробувань протягом 30 діб в кліматичній камері за екстремальних умов ($t = 60 \pm 10^\circ\text{C}$, відносна вологість 95 %, УФ-випромінювання $\lambda = 240$ нм) спостерігається деяке зниження пропускання в діапазоні 400÷550 нм, яке для Ті-ЕУ менше порівняно з ЕУ. Термогравіметричний метод показав кращу стійкість Ті-ЕУ до термодеструкції у порівнянні з ЕУ як до, так і після старіння в кліматичній камері.

Отже, синтезовані Ті-вмісні епоксиретани можна розглядати як перспективні композиції для формування захисного оптично прозорого покриття з ефективним блокуванням УФ-випромінювання.

1. Л. М. Ященко, Л. О. Воронцова, О. О. Бровко, *Спосіб одержання композиції для захисного оптично прозорого покриття* (Патент 122605. 2020) <https://iprop-ua.com/inv/pdf/lr103sx0-pub-description.pdf>.

2. M. A. Henderson, *Surface Science Reports*, **66**, No. 67: 185 (2011). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfrep.2011.01.001>.

ОКСИД ГРАФЕНУ - НОВИЙ ВУГЛЕЦЕВИЙ МАТЕРІАЛ

Н.А. Гаврилюк⁽¹⁾, **Г.П. Приходько**⁽¹⁾, **М.Т. Картель**⁽¹⁾, **Ол.Д. Золотаренко**⁽¹⁾,
Н.Е.Аханова^(4,5), **Д.В. Щур**⁽²⁾, **М.Т. Габдуллин**⁽⁴⁾, **І.В. Загоруйко**⁽³⁾, **О.П. Рудакова**⁽²⁾, **М.Султангазіна**⁽⁵⁾, **А.Д. Золотаренко**⁽²⁾, **О.Д.Золотаренко**⁽²⁾

⁽¹⁾ Інститут хімії поверхні ім. Чуйко НАН України,
Вулиця Генерала Наумова, 17, Київ 03164, Україна, O.D.Zolotarenko@gmail.com

⁽²⁾ Інститут проблем матеріалознавства імені Францевича НАН України,
Вулиця Кржижановського 3, Київ 03142, Україна, A.D.Zolotarenko@gmail.com

⁽³⁾ Інститут фізики металів імені Курдюмова НАН України,
Вулиця академіка Вернадського 36, Київ 03142, Україна, Zagorylko@ukr.net

⁽⁴⁾ Казахської-британський технічний університет (КБТУ)
д. 71, пр. аль-Фарабі, Алмати, 050040, Казахстан, Nazym@physics.kz

⁽⁵⁾ Національна нанотехнологічна лабораторія, КазНУ ім. Аль-Фарабі
д. 71, пр. аль-Фарабі, Алмати, 050040, Казахстан.

Оксид графену - це новий вуглецевий матеріал з високою активною питомою поверхнею, утворений шарами графену, краї яких покриті широким діапазоном функціональних кисневмісних груп. Ці групи разом з вакансіями вуглецю та дефектами, отриманими в процесі окислення, проявляють властивості хімічно активних центрів у каталітичних реакціях та у взаємодії з різними наночастинками.

Оксид графена (GO) активно вивчався протягом останніх десяти років для використання в найрізноманітніших галузях. Накопичено велику кількість фактів, що підтверджують високі характеристики цього матеріалу. Але, перш ніж його можна буде активно застосовувати в реальних умовах, необхідно додатково дослідити ще кілька важливих фактів:

Незважаючи на те, що залишається багато складних питань, початкові багатообіцяючі результати в різних областях свідчать про значний потенціал похідних графену в біомедичних дослідженнях. GO - це, по суті, нова форма окисленого вуглецю (або графіту), яка широко вивчалася і використовувалася протягом останнього століття. Майже всі сфери використання активованого вугілля (каталізатори та носії каталізаторів, сорбція газів та розчинених речовин, електроди та батареї, носії препаратів тощо) можуть бути вдосконалені за допомогою GO.

Наявність в Україні графітових мінералів робить Україну конкурентоспроможною із впровадження графенвмісних продуктів у промислове використання.

Основна увага в огляді зосереджена на хімії оксиду графену, його синтезі, хімічній структурі, фізико-хімічних властивостях та можливих застосуваннях, оскільки він має велике наукове значення як форма окисленого вуглецю та технологічну цінність як попередник для різних похідних графену та композитів.

САМООРГАНІЗАЦІЯ ВАКАНСІЙНИХ ДЕФЕКТІВ В ЕНЕРГЕТИЧНОМУ ПОЛІ

О. Засимчук, В. Засимчук, Т. Турчак

Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України

zasimchuk34@ukr.net

Самоорганізація в термодинамічних системах можлива при віддаленості системи від термодинамічної рівноваги та супроводжується зменшенням ентропії системи. У випадку кристалічного матеріалу, який пластично деформується, структурна самоорганізація відбувається за двома сценаріями: самоорганізація структури всього об'єму зразка, який пластично деформується (1) і самоорганізація окремих частин системи (зразка) (2). У другому випадку для кристалічного матеріалу це дефекти його кристалічної будови: дислокації, вакансії та інші. У першому випадку найбільш важливою і експериментально підтвердженою є самоорганізація структури кристалу у вигляді каналів гідродинамічної течії (ГК), коли дислокаційний механізм деформації стає неможливим через утворення релаксаційної структури, яка перешкоджає руху дислокацій. В таких випадках запобігання руйнуванню стає можливим лише при зміні механізму деформації від дислокаційного ковзання до локалізованих в елементах смугової структури каналів гідродинамічної течії (ГК). Пластична течія в таких каналах можлива лише при наявності в них рідиноподібної структури, яка забезпечується присутністю підвищеної концентрації вакансій, яка завжди супроводжує дислокаційне ковзання. При відсутності дислокацій і інших дефектів у вихідному стані (наприклад, в нанокристалах) утворення вакансій можливо при неоднорідності атомних коливань, про що вперше згадано в роботі [1]. В цій роботі вперше введено поняття атом- вакансійних станів. Таким чином, при зміні механізму деформації стає необхідною узгоджена поведінка вакансій, яка при їх самоорганізації може забезпечити утворення зародків ГК. Розглянемо теоретично можливість цього процесу. Використаємо рівняння, запропоноване у [2], для розподілу густини вакансій n по трьохвимірному зразку у стаціонарному випадку з урахуванням взаємодії між вакансіями. Для деяких видів енергії парної взаємодії вакансій можна одержати результат:

$$\Delta f + p_2 f = 0, \text{ де } n \approx C + f; C, p - \text{константи.} \quad (1)$$

$$\text{Можна представити } p \text{ у вигляді: } k_{12} + k_{22} + k_{32} = p_2, \quad (2),$$

де k_1, k_2, k_3 – деякі константи.

$$\text{Тоді ми маємо рішення: } f = A \cos k_1 x \cos k_2 y \cos k_3 z \quad (3).$$

Бачимо, що при $p_2 > 0$, ми маємо впорядковані осцилюючі рішення, а при деяких дискретних значеннях параметрів – а значить, при деяких дискретних p , існують такі k_1, k_2, k_3 , що рішення (3) існує при нульових граничних умовах, тобто, впорядковані осцилюючі рішення не задаються граничними умовами, тобто ми маємо самоорганізацію.

В нашій роботі ми показали, що самоорганізація може відбуватися тільки для вакансій, які розташовані поблизу поверхні зразку, тому поблизу поверхні можуть утворюватися ділянки з вакансій, які можуть бути зародками гідродинамічних каналів та мікротріщин.

1. V.E.Panin, V.E.Yegorushkin, Yu.A.Hon, T.F.Yelsukova, Izvestiya VUZov Fizika, 12:5 (1982) (in Russian).

2. О.В. Олійник, В.А. Татаренко, Допов.Нац.Акад.наук Укр.,№3 (2019)

ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ НАНОКОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК

Г.Ю. Михайлова, Є.Г. Ленъ, І.Є. Галстян, М.М. Якимчук, М.М. Шевченко,
О.Ю. Герасимов

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

В даний час зростає інтерес до наноструктурованих матеріалів і речовин у нанодисперсному стані. Серед них все більш помітне місце займають вуглецеві матеріали, які протягом тривалого часу приваблюють інтерес дослідників своїми унікальними властивостями, пов'язаними з можливістю його атомів утворювати різні аллотропні форми [1].

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

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

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

Було досліджено електропровідні властивості системи Cu-ВНТ у процесах навантаження-розвантаження, які сприяють встановленню контактів між сусідніми частинками та збільшенню їх площі, що змінює орієнтацію та геометрію ВНТ, відповідно, і властивості.

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

1. Olga A. Shenderova, Dieter M. Gruen Ultrananocrystalline diamond synthesis, properties, Norwich, New York, U.S.A.: William Andrew Publishing.– 2012. – 617 p.

РОЛЬ НАНОЧАСТИНОК, УТВОРЕНИХ ПРИ СТАРІННІ СПЛАВІВ ЗАЛІЗА І МІДІ, НА ЕФЕКТИ ПАМ'ЯТІ ФОРМИ І НАДПРУЖНОСТІ

Л. Демченко^{1(*)}, А. Тітенко², Т. Биканов¹, О. Тітенко¹, М. Бабанлі³, С. Гусейнов³

¹Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут ім. І.Сікорського», Київ, Україна

²Інститут магнетизму НАН та МОН України, Київ, Україна

³Азербайджанський державний університет нафти та промисловості, Баку, Азербайджан, [*lesyademch@gmail.com](mailto:lesyademch@gmail.com)

Перспективним напрямом матеріалознавства є розробка інтелектуальних матеріалів з функціональними властивостями, до яких відносяться ефекти пам'яті форми (ЕПФ) і надпружності (НП). Підвищений інтерес до «розумних» матеріалів (smart materials) обумовлений можливостями різноманітного їх використання як актуаторів мікродатчиків та мікроприводів, демпферів для гасіння вібрацій машин і механізмів, силових виконавчих механізмів різних пристроїв та інш. Широке застосування таких матеріалів в аерокосмічному і автомобільному комплексі, в приладо- і машинобудуванні, електроніці, біомедицині дозволяє займати їм пріоритетне місце в ієрархії найбільш затребуваних матеріалів. Пошук нових функціональних композиційних матеріалів на основі сплавів заліза та міді, які могли б проявляти ЕПФ і НП в широкому температурному інтервалі, представляє великий інтерес зв'язку з їх унікальними властивостями, в тому числі – фізико-механічними. Виділення нанорозмірних частинок різного хімічного складу, розміру і об'ємної долі при старінні є перспективним підходом до створення нового класу надміцних функціональних матеріалів з ЕПФ та НП на основі природних нанокompatитів [1-3]. Наночастинки, які утворюються при дисперсійному твердінні не зазнають МП, але за рахунок варіації їх хімічного складу, розміру та об'ємної долі можна керувати механічними і функціональними властивостями нанокompatитів. З метою управління НП та ЕПФ в широкому інтервалі температур, представляло інтерес вивчення впливу наночастинок, їх розмірів і кількості на ефекти непружної поведінки нанокompatиту, який утворюється в результаті старіння сплавів заліза (FeNiCoTi) і міді (CuAlMn).

Повна оборотність та малий температурний гістерезис $\Delta T = A_f - M_s$ (M_s – температура початку прямого МП при охолодженні, A_f – температура кінця оберненого МП при нагріві) в сплавах заліза і міді досягаються за рахунок створення нанокompatитної структури при старінні високотемпературної фази та магнітного впорядкування. Наночастинки $(\text{CoNi})_3\text{Ti}$ або Cu_2AlMn , які утворюються при дисперсійному твердінні аустенітної матриці сплавів заліза або міді зберігають когерентність з ґраткою мартенситу при МП, що відображається у підвищенні рівня міцнісних властивостей нанокompatиту та гальмуванні релаксаційних процесів. В той же час, наночастинки фази виділення сприяють зменшенню ширини температурного гістерезису МП і змінюють деформацію матеріалу з інваріантною ґраткою від ковзання до двійникування.

1. A. Titenko, L. Demchenko, M. Babanli, et al., *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **42**, No. 4: 531 (2020).
2. A. Titenko, L. Demchenko, A. Ye. Perekos, M. B. Babanli, A. Yu. Gerasimov et al., *Powder Metall. Met. Ceram.*, **59**: 271 (2020).
3. A. Titenko, L. Demchenko, L. Kozlova, M. Babanli, T. Z. Ren, Ya. Titenko, *Appl. Nanosci.*, **10**: 3097 (2020).

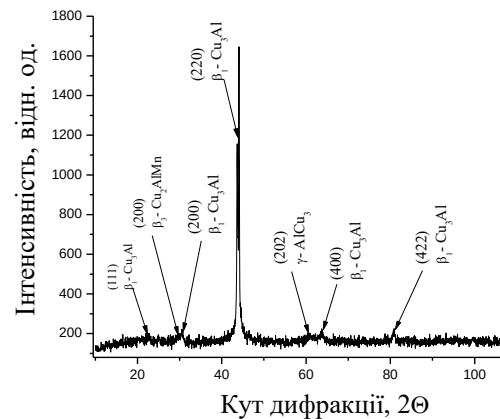


Рис. 1. Дифрактограма сплаву CuAlMn після термообробки: загартування і відпалу.

METHODS FOR PREDICTING THE HEAT CAPACITY OF TECHNICALLY IMPORTANT LIQUIDS

Zhelezny V.P.¹, Ivchenko D.A.^{1(*)}, Hlek Ya.O.¹, Khanchych K.Yu.²

¹*Odessa national academy of food technology, Kanatna str. 112, Odessa, Ukraine*

²*Odessa I.I. Mechnikov national university, Dvoryanska str. 2, Odessa, Ukraine*

**Tel.: +38 096 719 17 18, E-mail: dmitriy.ivchenko@gmail.com*

The problem of providing the energy industry with reliable data on the thermophysical properties of technically important liquids and nanofluids cannot be solved using only experimental or theoretical methods. Therefore, the aim of the further development of models for predicting the thermophysical properties of complex thermodynamic systems is actual.

The report provides a critical analysis of the existing methods for calculating the thermophysical properties. It is shown that they do not take into account the fundamental differences between the properties of liquids and gas or solid phases of substances. Moreover, the change in the structure of the liquid phase of substances in a wide temperature range is also ignored.

In order to develop a new fluctuation model for predicting the thermophysical properties, the authors propose to analyze changes in such fundamental properties of liquids as fluctuations of thermodynamic functions. The report provides a detailed analysis of the temperature dependences of density fluctuations for pure substances of various classes. It is shown that the dependences of fluctuations of density and heat capacity on the reduced temperature ($t=1-T/T_C$) in logarithmic coordinates for most substances have three distinct sections: 1 - the vicinity of the critical point, where all substances behave similarly; 2 - a regular area, where the individual properties of a substance are determined by the potential of intermolecular interaction; 3 - a region in a wide vicinity of the triple point, where significant deviations from thermodynamic similarity are observed (due to the increasing role of van der Waals interaction between molecules in the formation of short-range order in the liquid phase).

Conclusions. It is established that the thermodynamic similarity of substances can be based on the equidistant character of the temperature dependences of their density fluctuations. It is proposed to use the temperature dependences of the density fluctuations as a basis for the development of a universal method for predicting the heat capacity of various substances on the boiling line.

Acknowledgments: National Research Foundation of Ukraine, project No. 2020.02/0125

EXPERIMENTAL SETUP FOR MEASURING THE MELTING ENTHALPY OF PARAFFIN/NANOPARTICLES PHASE CHANGE MATERIALS

Paskal A.A., Hlek Ya.O.^(*), Diachenko I.A., Khliyeva O.Ya., Zhelezny V.P.

Odessa national academy of food technology, Kanatna str. 112, Odessa, Ukraine

**Тел.: +38 097 744 97 22, E-mail: yanaglek90@gmail.com*

The temperature and enthalpy of melting also as thermal conductivity are the most important properties that determine the expediency of thermal storage materials with phase transition (PCM) in industry. The nano-structurization of PCM is one of the prospective ways for mentioned properties enhancement. The description of a new experimental setup for measuring the melting enthalpy of composite paraffin wax PCM (including PCM containing nanoparticles) is presented in the study – Fig.1.

The measured values of thermal energy spent on the PCM heating and melting also as the melted PCM mass were used for melting enthalpy evaluation. The compensating method was used for obtaining the consumption thermal energy values. The voltage drop for heater 10 and standard resistor 12 were measured. The measuring cell temperature was controlled by absolute copper-constantan thermocouple 6. The electric parameters were recorded by high-precision multimeter 14. The analytical balance was used for cell, container and PCM mass measurements. The vacuum chamber ($5 \cdot 10^{-2}$ mm Hg) and shield 5 were used for convective and irradiative heat loss minimization.

The melting enthalpy of paraffin wax containing both the fullerene C₆₀ and multi-wall carbon nanotubes has been measured. For uncertainty minimization, all measurements were performed multiply using various amounts of PCM.

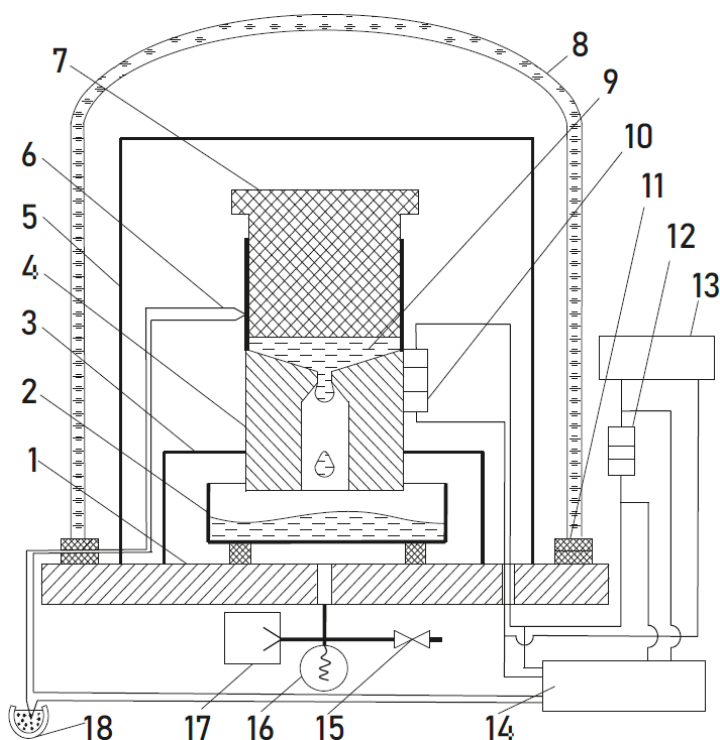


Fig. 1 Schematic diagram of the setup:

- 1 – platen; 2 – container for melted PCM;
- 3 – holder; 4 – measuring cell; 5 – shield; 6 – thermocouple; 7 – teflon piston; 8 – vacuum hood; 9 - test sample; 10 - heater; 11 – vacuum seal; 12 – standard resistor; 13 - power supply; 14 – multimeter; 15 – air valve; 16 – thermocouple pressure transmitter; 17 – vacuum pump; 18 – Dewar vessel with $t=0$ °C

Acknowledgments: National Research Foundation of Ukraine, project No. 2020.02/0125

NOVEL APPROACH TO ANALYSIS OF PV ENCAPSULANT MATERIAL PROPERTIES

**V.V.Kislyuk¹, V.M.Shyvaniuk¹, V.V.Trachevskij², Yu.O.Polushkin¹ and
S.O.Kotrechko¹**

¹*G.V.Kurdyumov Institute of Metal Physics, NAS of Ukraine, 36 Academician
Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv, Ukraine*

²*Technical Center, NAS of Ukraine, Pokrovs'ka St., 13, UA-04070, Kyiv, Ukraine
E-mail: viktor.kislyuk@gmail.com*

The producers of the photovoltaic (PV) modules guarantee their stable performance for 25 years with no more than 20% reduction. Actually, the property deterioration is more dramatic. The prediction leaves aside the UV- (ultraviolet) and thermomechanical load-induced degradation of the encapsulant material which is ethylene vinyl acetate (EVA) in ca. 80% cases. However, EVA is not a perfect solution, and the search keeps on for more appropriate laminants with oxygen- and moisture-blocking fillers etc. Hence, the development of the appropriate techniques for their rating is the actual objective. One of the possible reason of the EVA degradation is the loss of its integrity, in particular, as a consequence of the temperature expansion mismatch at the interfaces of glass-encapsulant-active PV element under UV. This is the material mechanical strength and its durability against environment impacts that we concentrate upon as a crucial point. There are two distinct peculiarities of these materials to be kept in mind while analyzing their mechanical properties: i) true stress- true strain must be considered rather than engineering notation; ii) Poisson coefficient is dependent on the strain. The former is characteristic for large deformations with true and engineering strains differing by the orders of magnitude. The latter is attributed to the variability of the Poisson coefficient relating to the tensional elongation, which transforms substantially the stress-strain representation (curve 2, fig.1). ¹H NMR spectra are analyzed in correlation with the stress and strain for the EVA samples under UV and mechanical tension.

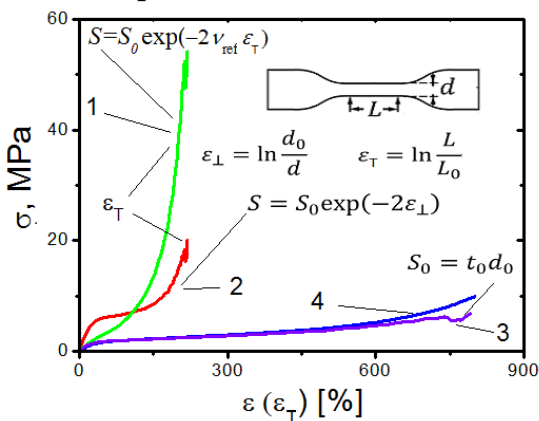


Fig.1. Various representations of the stress vs strain based on: the true strain ε_T (1,2) and engineering strain ε (3) in comparison with reference [4] (curve 4). ε_T is calculated with Poisson coefficient taken as: 1 – ν_{ref} the constant reference value of 0.48; 2 – measured value. The cross-section area S is calculated for each curve with t , L , d being thickness, base length and width, respectively.

Inset. The sample shape.

1. Ch. Hirschl, M. Biebl–Rydlo, M. DeBiasio, W. Mühleisen, L. Neumaier, W. Scherf, G. Oreski, G. Eder, B. Chernev, W. Schwab, M. Kraft, *Sol. En. Mater. & Solar Cells*, **11**,: 203 (2013), <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2013.04.022>.

ПЛАЗМОННА СПЕКТРОСКОПІЯ РІЗНИХ СТАНІВ ПОВЕРХНІ МОНОКРИСТАЛІВ W(110)

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

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

**Тел.: +38 044 4242520 E-mail: kolwen@ukr.net*

На сьогодні значна частка електроенергії може вироблятися прямим перетворенням теплової енергії на електричну за допомогою термоемісійних перетворювачів (ТЕП). Одним із способів поліпшення технічних характеристик ТЕП, що працюють при високих температурах, є використання катоду і аноду однакового хімічного складу, але з різною роботою виходу електронів з їх поверхонь. Тому для стабільної роботи електроди ТЕП виготовляють з монокристалів одного й того ж тугоплавкого металу, але з різною орієнтацією їх робочих поверхонь відносно кристалографічних площин. Відомо, що багато важливих властивостей металів визначаються структурою і фізико-хімічним станом їх поверхневих шарів. З іншого боку, характеристики плазмонів надзвичайно чутливі до фізико-хімічного стану металевих поверхонь. Розуміння механізму збудження об'ємних і поверхневих плазмонів відкриває нові можливості використання вторинної електронної емісії для аналізу фізико-хімічного стану поверхні матеріалів, що використовуються в різних галузях техніки, зокрема і в інноваційній енергетиці. У зв'язку з цим, безумовно, є актуальним вивчення властивостей порізного орієнтованих поверхонь монокристалів тугоплавких металів, у тому числі вольфраму, після різних режимів термообробки за допомогою методу плазмонної спектроскопії.

В даній роботі формування плазмонів у спектрах вторинної електронної емісії досліджено для двох зразків монокристалу W(110) після східчастого нагріву в діапазоні 1000—2800 К у вакуумі не гірше $5 \cdot 10^{-7}$ Па. У першому зразку W (110)-1 після циклічного відпалу при високих температурах (понад 2500 К) поверхня була збагачена вуглецем за рахунок сегрегації його з об'єму, а у другому зразку W (110)-2, який відпалювався при менших температурах і тривалості відпалу, концентрація вуглецю на поверхні та у приповерхневому шарі була практично однакова. Для матеріалів, що використовуються для електродів ТЕП надзвичайно важливо знати зміну роботи виходу електронів з поверхні в результаті різних теплових, йонних та газових впливів, тому енергії поверхневих і об'ємних плазмонів вимірювалися у таких станах поверхні зразків: а) початковий, б) після відпалу при температурі 1973 К, в) після експозиції в атомарно-чистому кисні, г) після очистки поверхні йонами Ar^+ з енергією 700 еВ. Всі вимірювання виконані за допомогою надвисоковакуумного низькоенергетичного електронного спектрометра, що обладнаний чотирьохсітчним напівсферичним енергоаналізатором, а також електронною та іонною гарматами [1].

Розраховано усереднені значення енергії поверхневих і об'ємних плазмонів та їх відношення, концентрацію електронів провідності, що беруть участь у плазмових коливаннях, одержано значення роботи виходу електронів з поверхні обох зразків монокристалу W (110). Показано, що робота виходу електронів для зразка W(110)-2, поверхня якого збагачена вуглецем, має більші значення в порівнянні з W(110)-1.

ОСОБЛИВОСТІ РАЦІОНАЛЬНОГО ВИБОРУ ПРИСАДНИХ ПОРОШКІВ ЖАРОСТІЙКИХ СПЛАВІВ НА НІКЕЛЕВІЙ ТА КОБАЛЬТОВІЙ ОСНОВІ ДЛЯ ДУГОВОГО 3D-НАПЛАВЛЕННЯ

Ющенко К.А.¹, Яровицин О.В.^{(*)1}, Черв'яков М.О.¹, Волосатов І.Р.¹, Хрущов Г.Д.¹, Пестов В.А.¹, Наконечний О.О.¹, Микитчик А.В.², Чигилейчик С.Л.³, Кондратюк С.Є.⁴, Желєзняк Н.П.⁴

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

²ДП «Міжнародний центр електронно-променевих технологій ІЕЗ ім. Є.О. Патона НАН України» м. Київ, вул. Антоновича 68, Україна

³АТ «Мотор Січ», м. Запоріжжя, пр-кт Моторобудівників, буд.15, Україна

⁴ФТІМС НАН України, м. Київ, бульв. Академіка Вернадського 34/1, Україна

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

Не зважаючи на значні успіхи розвитку технологій 3D-наплавлення, для них залишається актуальною проблема забезпечення технологічної міцності виробу як з точки зору вибору базового хімічного складу присадного матеріалу так і наявності в ньому домішок кисню та азоту.

Методом EDX-аналізу для присадних порошків IN625 та Hastelloy C22 з відмінним середньоваговим вмістом [O] та [N] виконано порівняльний аналіз розподілу цих домішок на поверхні та в поперечному перерізі часток. Аналогічно попереднім дослідженням порошку жароміцного сплаву ЖС32 встановлено наявність значного градієнту приповерхневої концентрації кисню та азоту порівняно з внутрішніми об'ємами дисперсної частки.

Для жаростійких сплавів на нікелевій (IN625, Hastelloy C22, ЧС40) та кобальтовій (Ultimate, Stellite 6, Stellite 12) основах шляхом визначення середньовагового газовмісту домішок кисню $[O] \leq 0.16$ ваг. % та азоту $[N] \leq 0.13$ ваг. % за методикою відновного плавлення в потоці газу-носія досліджено закономірності їх переходу з присадних порошків у відповідний наплавлений метал при мікроплазмовому порошковому наплавленні та впливу на його короточасні механічні властивості при 20, 1000, 1100°C.

Встановлено, що збільшення вмісту кисню та азоту у вихідному присадному порошку жаростійких нікелевих сплавів понад їх оптимальний вміст $[O], [N] \leq 0.025$ ваг. %, в першу чергу, призводить до зниження у 2.5-4 рази показників руйнівної деформації $\epsilon_{1100^\circ\text{C}}$ при випробуваннях відповідного наплавленого металу на статичний розтяг при температурах 1000 та 1100°C. Аналогічні результати зі зниження значень $\epsilon_{1100^\circ\text{C}}$ спостерігаються і для присадних порошків на кобальтовій основі. Отримані результати свідчать про можливість значного підвищення опірності проти утворення тріщин повторного нагріву в умовах послідовного перебігу зварювальних термодетформаційних циклів в процесі формування багатошарового наплавлення для розглянутих типів наплавленого металу шляхом обмеження в ньому вмісту кисню і азоту, в першу чергу – за рахунок використання відповідних присадних порошків зі зниженим їх вмістом.

МОДЕЛЮВАННЯ ЕВОЛЮЦІЇ ДЕФЕКТНОЇ СТРУКТУРИ ПРИ НЕЙТРОННОМУ ОПРОМІНЕННІ СПЛАВІВ ZR-NB

Харченко Д.О., Харченко В.О.^(*), Щокотова О.М., Купрієнко В.В.,
Баштова А.І., Лисенко О.Б., Кохан С.В.

*Інститут прикладної фізики НАН України,
вул.Петропавлівська 58, Суми, 40000, Україна*

**Тел.: +38 050 870 4791 E-mail: vasiliiy@ipfcentr.sumy.ua*

Добре відомо, що сплави на основі цирконію характеризуються наднизьким перерізом розсіяння теплових нейтронів з високою теплоотою топлення широко використовуються при виготовленні конструкцій оболонок паливних елементів для вже існуючих реакторів на легкій та важкій воді. Цирконієві сплави використовуватимуться у нових реакторах при підвищених температурах тепловидільних елементів з метою забезпечення повного вигорання ядерного палива. За важливістю практичності застосувань цих сплавів дослідження їх не втрачає своєї актуальності на сьогоднішній день. Важливими при цьому постають задачі щодо виявлення особливостей формування та еволюції дефектної структури у таких сплавах за різних режимів опромінення, що спричиняє зміну їх фізико-механічних властивостей.

Проведено дослідження процесів формування та розвитку дефектної структури у бінарних сплавах Zr-Nb, опромінюваних нейтронами за допомогою числового моделювання шляхом комбінування методів кластерної динаміки, швидкісної теорії та фазового поля. Тут проводиться розвиток та застосування положень теорії швидкостей реакцій для дослідження динаміки кластерів дефектів на малих дозах, характерних для формування дефектної структури. Побудовано динамічну модель кластерної динаміки з урахуванням впливу концентрації ніобію та розміру преципітатів. Проведено аналіз дозових залежностей концентрацій кластерів дефектів та статистичний аналіз кластерів за розмірами. Встановлено залежності швидкості їх росту з кластерів середнього розміру від параметрів опромінення та мікроструктури. На великих дозах проведено детальний аналіз росту дислокаційних петель та деформацій при радіаційному рості. Виявлено вплив концентрації ніобію на характер розвинутої дефектної структури, розміру преципітатів, встановлено розподіл петель за розмірами в зерні залежно від віддаленості від межі зерна та можливість одночасного існування міжвузлових та вакансійних петель у призматичних площинах, проведено оцінку зміцнення, індукованого розвинутою структурою дефектів. Проведено моделювання еволюції мікроструктури методом фазового поля на основі термодинамічного підходу CALPHAD, комбінованого з теорією швидкостей реакцій з метою дослідження впливу дислокацій невідповідності та нерівноважних вакансій на стійкість преципітатів ніобію. Досліджено вплив режимів опромінення на стійкість преципітатів та зміна концентрації ніобію в них.

MODELING OF B2- AND L10-TYPE LOCAL SHORT-RANGE ORDER IN THE NI-AL SYSTEM

A. Timoshevskii^{1(*)}, Y. Matviychuk¹, G. Gerstein², H. J. Maier²

¹G.V.Kurdyumov Institute for Metal Physics, Kyiv, Ukraine

²Institut für Werkstoffkunde (Materials Science), Leibniz Universität Hannover, Garbsen, Germany,
atimoshevskii@gmail.com

Ni-Al alloys exhibit a martensitic diffusionless phase transformation from the B2 type austenitic phase to tetragonal L1₀. This is experimentally observed only in NixAl1 - x (x = 0.62-0.69) nickel-enriched compositions. In this case, in addition to pure Ni layers, Al-Ni layers are formed in the alloy. Many authors were using molecular dynamics method for studying the mechanisms of martensitic transformation [1]. These studies discovered that it is Bain transformation, it is reversible, demonstrates temperature hysteresis and is influenced on the applied stresses. The possibility of the simplest possible in terms of symmetry Bain transformation in Ni-Al assumes its high reversibility, since the initial and final phases are closer by symmetry when compare for example with those of NiTi (B2 → R → B19') and ZrCu (B2 → B19+Cm). However, the experimental studies reveal that the Ni-Al alloy in this concentration interval is subject to decomposition into a number of high-symmetry crystalline phases. The reason for this is that the ordering of Ni atoms in the Al layers is energy advantageous. The target of the present work is to demonstrate that it is possible to block the Ni ordering process, and create the alloys with reversible B2- L1₀ transformation on the basis of Al-Ni system. The calculations have been performed using the Vienna ab-initio simulation package VASP 5.4.4 [2]. All calculations were performed for the temperature T=0. A number of model fcc structures Ni₁₆Al_{16-n}Ni_n (2x2x2) SQS type [3], which simulate Ni disordering in Al layers, was used to model the atomic structure of the alloys and estimate the enthalpies of their formation. To verify the validity of the simulation results, we have also used the model structures of larger size (3x3x2) containing 72 atoms in a unit cell. A comparison of the obtained results is shown in Fig. 1. The lattice tetragonality parameters are determined experimentally for the Ni₆₆Al₃₄ samples that were prepared under the different cooling rates: 600, 1200 and 4x10⁴ K s⁻¹. It was found that increasing cooling rate results in the formation of new phases. Using SQS structures, we have modelled the atomic structure of the alloys that were obtained experimentally at high cooling rate. The calculation results have shown that in those model structures of 65-66 at. % Ni concentration there exist 2 types of local short-range order – namely, B2 and L1₀. Formation energy of those SQS structures is energetically more advantageous than the Ni₃Al alloys formation energy. This is demonstrated also at the Fig. 1, which shows the dependences of the formation enthalpies of the model structures on the degree of their tetragonality. The atomic structure of structures A and B modeling the austenitic and martensitic phases, respectively, has been investigated. Diffractograms of these phases are calculated theoretically. It was found that the partial replacement of Al by Ti atoms blocks the Ni ordering in the Al layers and promotes the formation of a local short-range order of B2 type as in the NiTi intermetallic.

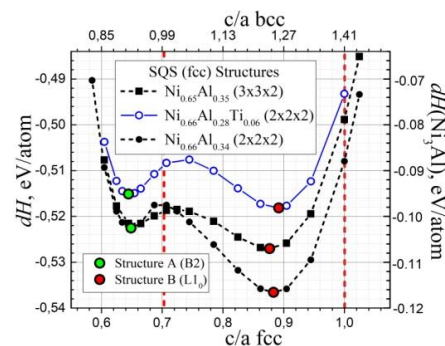


Fig. 1. Dependences of the formation enthalpies of model structures of their tetragonality

1. G P Purja Pun and YMishin, J. Phys.: Condens. Matter **22** (2010) 395403
2. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11 169 (1996).
3. A. van de Walle, et al., Calphad Journal **42**, 13 (2013).

NON-UNIVERSAL OPTICAL QUANTUM COMPUTING WITH CONTINUOUS WAVE DETECTION

Len V. E.^{1, 2 (*)}, Semenov A. A.²

¹ *Taras Shevchenko National University of Kyiv, Glushkova 4, Ukraine*

² *Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, Metrologichna 14-b, Ukraine*

^{*} *Tel.: +38 067 238 3038 E-mail: len.vikusik@gmail.com*

The boson sampling scheme is a non-universal quantum computer which is used to calculate permanents of matrices [1-2]. The algorithm was considered in the case of photodetection by the continuous wave method, taking into account the dead time of detectors. This imperfect detection method is used in order to be able to distinguish adjacent numbers of photons. The probability of the distribution of the registration photon number at the output is related to the permanent. We investigate whether it is possible to express the permanent from the corresponding formulas for the considered realistic photodetection and what type of dependencies between continuous wave detection method and ideal photodetection does it provide. We believe that the obtained result will make it possible to implement boson sampling for calculating the permanent of much larger orders than it is possible now.

1. S. Scheel, Permanents in linear optical networks, *Acta Physica Slovaca* 58, 675 (2008).

2. S. Aaronson, and A. Arkhipov, The computational complexity of linear optics, *Theory of Computing*, 9, 143–252 (2013).

МАГНІТОГЕНЕЗ З КІНЕТИЧНИМ ЗВ'ЯЗКОМ

Штанов Ю. В.¹, Павлюк М. В.^{1, 2(*)}

*Tel.: +38 063 770 9967 E-mail: pavliukconnection@gmail.com

¹ Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, Metrologichna 14-b, Ukraine

² Taras Shevchenko National University of Kyiv, Glushkova 4, Ukraine

У роботі отримано прості модельно-незалежні оцінки максимального значення напруженості магнітного поля, що виникає у інфляційному та постінфляційному магнітогенезі, з урахуванням зворотної реакції та ефекту Швінгера. За цими оцінками, величина магнітного поля виявляється досить низькою для космологічно значущих просторових масштабів. Деякі вищі обмеження на магнітне поле отримано за припущення, що деякий невідомий механізм пригнічує ефект Швінгера у ранньому Всесвіті.

BOSON SAMPLING WITH REALISTIC DETECTORS

Mariia Byelova^{1(*)}, Andrii Semenov²

1 Physics Department, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Ukraine

2 Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

**Tel.: +38 0990442451 E-mail: byelovam@gmail.com*

The main focus of this work is boson sampling [1, 2] — a non-universal quantum algorithm designed to solve a specific computational problem of matrices permanents. The permanent is similar to the determinant, but surprisingly more computationally complex, so there are no classical algorithms that can solve this problem at an acceptable rate available today. The experimental scheme for boson sampling requires single-photon sources, a multiport linear interferometer and single-photon detectors. Though, it has a major drawback — the difficulty of discriminating adjacent photon numbers during the detection event. We suggest a theoretical result that allows us to obtain correct values of permanent in the context of using realistic arrays of on/off detectors. We believe that the adaptation of the boson sampling algorithm may be useful for further boson sampling research.

[1] S. Scheel, Permanents in linear optical networks, *Acta Physica Slovaca* 58, 675 (2008).

[2] S. Aaronson, and A. Arkhipov, The computational complexity of linear optics, *Theory of Computing*, 9, 143–252 (2013).

“CORE-SHELL” Ti-Ni-BASED NANO-PARTICLES PRODUCED BY SPARK EROSION METHOD AND THEIR POSSIBLE ENERGY CONVERSION AND SUSTAINABILITY APPLICATIONS

Monastyrsky G.E.^{1(*)}, Gilchuk A.V.¹

¹ *National Technical University of Ukraine “Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”, 37, Prosp. Peremohy, Kyiv, 03056, Ukraine*

*Tel.: +380 44 204 8093 E-mail: monastyrskygennady@gmail.com

Ti-Ni is a well-known shape memory alloy (SMA). It is currently used primarily for medical purposes. However the scope is wider, including energy conversion and energy harvesting systems. Particularly, there is renewed interest to the Stirling’s engine based on Ti-Ni SMA [1]. Interest to the nanostructured Ti-Ni increases as well. For example, Ti-Ni nanopowder is used as hydrogen storage material [2]. More complex structures like core-shell Ni@Ti, Ni@TiO₂ and NiO@TiO₂ nanoparticles can occur as a side product during Ti-Ni nanopowder obtaining [3]. These structures are promising for their application for fuel cells, solar cells and photocatalysis for hydrogen generation.

As was shown in [4,5] several kinds of nanosized particles are formed during spark erosion of Ti-Ni-based alloys in liquid argon. The morphology, composition, and fine structure of the nanosized particles were investigated by transmission electron microscopy (TEM), high-resolution (HRTEM) and energy-filtered (EFTEM) transmission electron microscopy and energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX) analysis. It was found that the finest particles (5-20 nm) consist of TiO and NiO. While some of

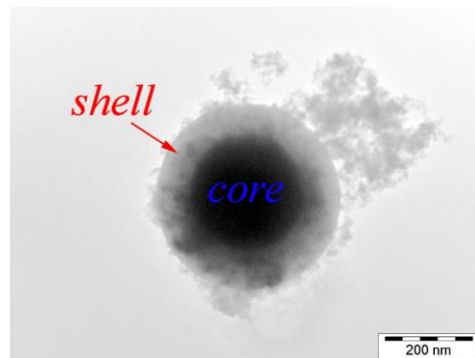


Fig. 1 “Core-shell” particle: Ni-rich core, shell - TiO

the particles of several tens and even hundreds of nanometers have a “core-shell” structure (Fig. 1). It has been revealed that both core and shell have FCC structure. The Ni-rich core of that particles has the composition close to the eutectic between the Ni and Ni₃Ti. The composition of shell is close to TiO. The formation mechanism of the “core-shell” particles by spark erosion method, technological opportunities of enlarging their output as well as their use for energy conversion and sustainability applications are discussed.

1. P. Kumar, et al. *Applied Energy* **251**, 113277 (2019) DOI: 10.1016/j.apenergy.2019.05.080.
2. T. Nobuki, et al. *International Journal of Hydrogen Energy* **44**, 21 (2019) DOI: 10.1016/j.ijhydene.2019.02.203.
3. M. Arzi, et al. *Appl. Phys. A* **124**, 625 (2018) DOI: 10.1007/s00339-018-2050-2
4. G.E. Monastyrsky *Nanoscale Research Letters* **10**, 503 (2015) DOI:10.1186/s11671-015-1212-9.
5. G.E. Monastyrsky, V.I. Kolomytsev, Yu.N. Koval, P. Oshan, G. Wang, O. M. Ivanova, N.I. Danilenko *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **33**, No. 3: 289 (2011) (in Russian).

FEASIBILITY ESTIMATION OF NEW SCHEMATIC SOLUTION OF HYBRID PHOTOVOLTAIC/THERMAL COLLECTOR WITH DIRECT SOLAR ENERGY ABSORPTION

Khliiev N.O.^{1(*)}, **Nikulin A.**²

¹*Odessa I.I. Mechnikov national university, Dvoryanska str. 2, Odessa, Ukraine*

²*CICenergiGUNE (BRTA), Alava Technology Park, Albert Einstein 48, Vitoria-Gasteiz, Spain*

**E-mail: khliyevn@gmail.com*

A novel schematic solution of a spectral beam splitting hybrid photovoltaic-thermal (PV/T) collector that utilizes direct absorption of solar energy has been proposed – Fig. 1. This study evaluates the initial feasibility of the proposed scheme to achieve high-grade efficiency of spectral splitting during generation of thermal energy simultaneously with electricity.

The solutions of fullerene C₆₀ in tetralin with the mass fraction up to 0.0010 kg·kg⁻¹ were chosen as a working fluid. This solution was chosen by the following reasons: 1) high absorbance value at low mass fraction of C₆₀ in the wavelengths range 350...650 nm with the pikes located between 340 and 420 nm (whereas the spectral response of crystalline silicon solar cells is between 850 and 950 nm); 2) low saturated vapor pressure values at high temperatures; 3) excellent colloidal stability.

The mathematical model for the numerical experiment using CFD software package for the simulation has been build and worked out. Geometric model of the PV/T collector is presented in Fig. 2. A series of numerical experiments varying the geometric parameters, flow rate, and C₆₀ mass fraction were performed. As a result the optimal PV/T collector solution and its working regimes were found.

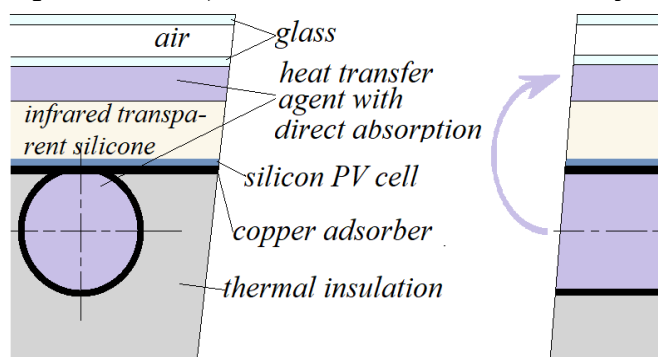


Fig. 1 - schematic diagram of the splitting PV/T collector

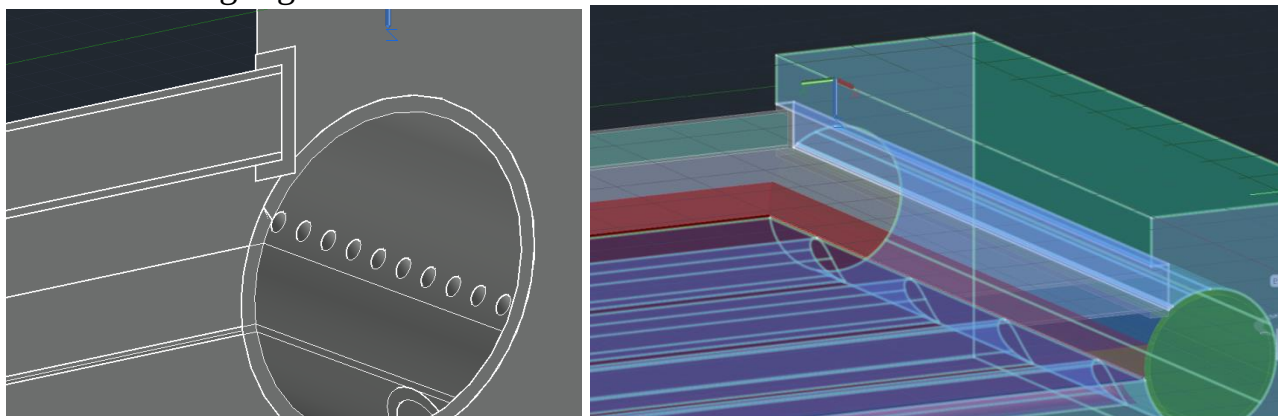


Fig. 2 – Geometric model of the splitting PV/T collector

INFLUENCE OF THE FULLERENE C₆₀ IN PARAFFIN WAX ON TRANSIENT HEAT TRANSFER IN THERMAL ENERGY STORAGE CAPSULE

Paskal O.A.*, Ivchenko D.O., Khliyeva O.Ya., Zhelezny V.P.

Odessa national academy of food technology, Kanatna str. 112, Odessa, Ukraine

**Тел.: +38 099 554 29 08, E-mail: pascalaleksey93@gmail.com*

The transient heat transfer in a cylinder energy storage capsule (ESC) filled with phase change materials (PCMs) has been experimentally investigated. As PCM materials have been taken: paraffin wax (PW) of industrial grade with melting temperature 53.5 °C and PW containing 0.936 g·kg⁻¹ of fullerene C₆₀ (mass fraction was chosen taken into account the formation of a saturated solution of C₆₀ in melted PW).

The previous experimental study of PW containing 0.936 g·kg⁻¹ of C₆₀ (PW+C₆₀) showed a significant increase in solid phase thermal conductivity (up to 80 % in comparison with pure PW) and insignificant influence on solid and liquid phase density also as liquid phase viscosity. Thus the experimental investigations of the transient heat transfer in ESC containing PW+C₆₀ as PCM are actual for estimation of PW+C₆₀ as PCM industrial expediency.

The experimental cell was considered as a model of ESC. The cell was produced from copper and has 12 mm in diameter and 120 mm in height. Two thermocouples were installed in half of the ESC height: an absolute in the ESC center and a differential near the ESC wall. The experiment was conducted at constant ESC wall temperature boundary conditions in the way that solid-liquid phase transition could be registered. The two modes have been experimentally investigated: 1)ESC filled with PCM samples was heated at forced convection from 0 °C after dipped it into 70 °C water; 2)ESC was cooled from 70 °C after dipped into melting ice. The obtained time dependence of the temperature in the ESC center is presented in Fig. 1.

As we can see from Fig. 1, the PW+C₆₀ has a slightly higher heating rate in comparison with PW. For the final interpretation of the results obtained, the measurement of the caloric properties, also as liquid phase thermal conductivity for PW and PW+C₆₀ is going to be performed by authors.

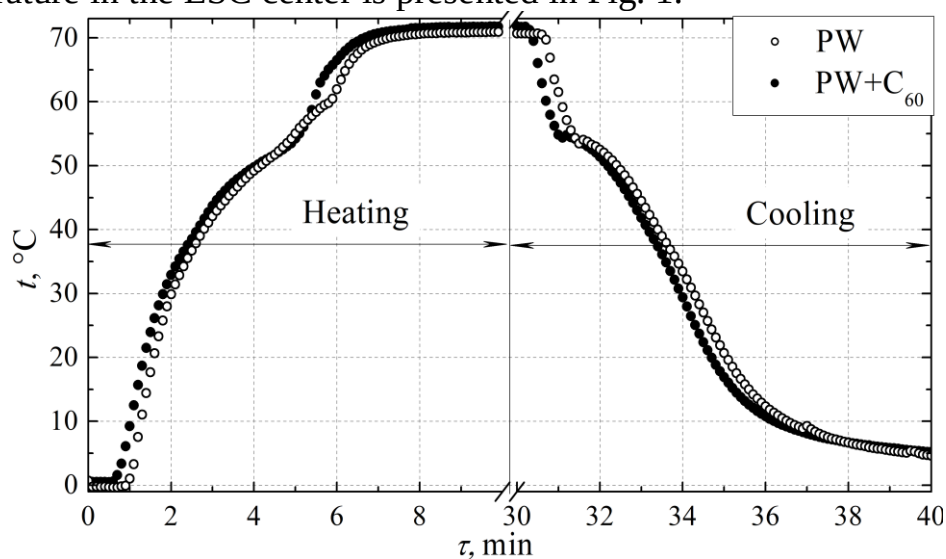


Fig. 1 – Time dependence of the temperature of PCM in center of the ESC at heating and cooling modes

Acknowledgments: National Research Foundation of Ukraine, project No. 2020.02/0125

Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України

Україна, 03142, Київ бульвар Академіка Вернадського, 36

Телефон:

Дирекція: + (380) 44 424-10-05

Учений секретар: + (380) 44 424-31-10

Факс: + (380) 44 424-25-61

Email: metall@imp.kiev.ua

Організаційний комітет

Віталій Бевз (голова), Ірина Галстян (секретар), Галина Михайлова, Євген Лень, Олександр Кондауров, Сергій Мокляк, Микола Якимчук, Михайло Рудь, Вікторія Лень, Марія Власова, Тетяна Владімірова, Олег Решетнік, Андрій Лень, Геворк Галстян, Володимир Дехтяренко, Олег Бошко, Дмитро Пакула, Олена Скакунова

Телефон: + (380) 44 424-13-31

Секретар: + (380) 93 254-20-10

Email: fmie_2019@imp.kiev.ua; stenforti@ukr.net

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