

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
МАЛА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
“ПОЛТАВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА  
ІМЕНІ ЮРІЯ КОНДРАТЮКА”



МІНІСТЕРСТВО  
ОСВІТИ І НАУКИ  
УКРАЇНИ



United Nations  
Educational, Scientific and  
Cultural Organization

М.З.Н.

Мала академія наук  
України під егідою  
ЮНЕСКО

# ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ XVI МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ “АКАДЕМІЧНА Й УНІВЕРСИТЕТСЬКА НАУКА: РЕЗУЛЬТАТИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ”



2025

*років освітніх традицій*

**12-13 ГРУДНЯ 2023 РОКУ**

УДК 544.015.4:544.034.5

**ПЛАВЛЕННЯ АНІЗОТРОПНОЇ СУБМОНОШАРОВОЇ СТРУКТУРИ  
ЛІТІЮ НА ГРАНІ (112) МОЛІБДЕНУ**

**Лобурець А.Т.**

*Національний університет «Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»  
anatollob@gmail.com*

**Заїка С.О., Федорус О.Г.**

*Інституту фізики Національної академії наук України*

У сучасних технологіях широко застосовують різні об'єкти нанометрових розмірів. Вони володіють такими фізико-хімічними властивостями, які можуть значно відрізнятися від властивостей зразків тієї ж речовини, але макроскопічних розмірів. Це зумовлює необхідність проведення спеціальних досліджень для вивчення можливостей керованого впливу на властивості нанооб'єктів різної природи [1]. Субмоношарові адсорбовані плівки дуже сильно змінюють фізико-хімічні властивості поверхонь металів. Це широко застосовується на практиці, але сьогоднішній рівень нашого розуміння процесів на поверхнях різної природи все ще залишається відносно низьким. Ми розглядаємо фазові перетворення адсорбованої плівки літію на сильно анізотропній грані (112) молибдену при покритті  $\theta_{Li} = 0.25$ . Це відповідає структурі  $p(4 \times 1)$ . Раніше ми в реальних експериментах проводили вивчення поверхневої дифузії літію на різних гранях монокристалів вольфраму і молибдену. Було показано, що фазовий стан адсорбованих плівок сильно впливає на процеси поверхневої дифузії та роль колективних механізмів у таких процесах. Про це свідчили непрямі докази. На атомарному рівні ці явища не досліджувалися через недостатню роздільну здатність методики та надзвичайно високу швидкість еволюції колективних утворень і вплив флуктуацій на процеси у двовимірних системах. Зараз ми здійснили спробу дослідити ці явища застосувавши створену нами на основі молекулярної динаміки математичну модель.

Як відомо, термодинамічними системами є такі об'єкти, де виконуються закони термодинаміки. Вони складаються з достатньо великої кількості атомів чи молекул, до яких можна застосовувати статистичні методи, а мінімальні розміри системи вимірюються мікронами. Наночастинками є такі об'єкти, розміри яких обмежуються зверху сотнями нанометрів. На перший погляд, здається, що термодинаміку не можна застосовувати до нанооб'єктів. Як засвідчує велика кількість експериментальних фактів, такі явно термодинамічні процеси, як плавлення і кристалізація тривимірних наночастинок (фазові переходи першого роду), дійсно існують, але температури переходів сильно залежать від їхніх розмірів. У достатньо малих 3D кластерах рідка фаза вже не спостерігається. Такі кластери навіть можуть мати ікосаедричну будову, що не

властиво кристалам. Ще складнішими виявляються властивості двовимірних (2D) адсорбційних систем [2, 3]. У досліджуваних нами системах потенціальний рельєф підкладки є додатковим фактором, що формує структуру плівки.

**Мета.** Одержання нової інформації про природу фазових переходів у субмоношарових адсорбованих плівках із сильно вираженою анізотропією та механізми самодифузії у 2D плівках залежно від їхнього фазового стану.

**Методом** молекулярної динаміки досліджено фазові перетворення реальної сильно анізотропної структури  $p(4 \times 1)$  (рис. 1).

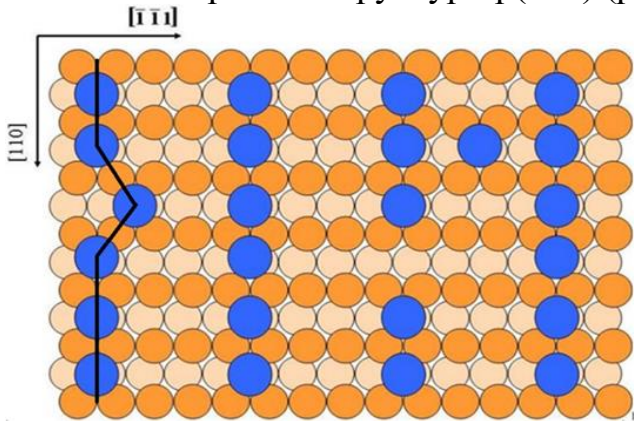


Рис. 1. Модель структури  $p(4 \times 1)$  (сині диски) на грані (112) о.ц.к. кристалу. На рисунку показано всі можливі дефекти її будови: кінк, вакансія та міжланцюжковий адатом

На рис. 2 демонструється виявлена нами перехідна косокутна структура, що утворює разом з  $p(4 \times 1)$  бінарну систему. Обидві фази перебувають у стані рідкої фази завдяки нав'язаному поверхнею адсорбента далекому порядку.

У рідкій фазі атоми постійно здійснюють вібрації відносно центрів адсорбції (рис.3). Досить рідко вони здійснюють стрибки на сусідні адсорбційні центри. Ще рідше спостерігаються поетапні довгі стрибки в основному вздовж борозенок адсорбента (напряв [111]) з тимчасовою локалізацією. Це характерно як для рідин, так і для газів. У рідинах причиною є утворення брізерів.



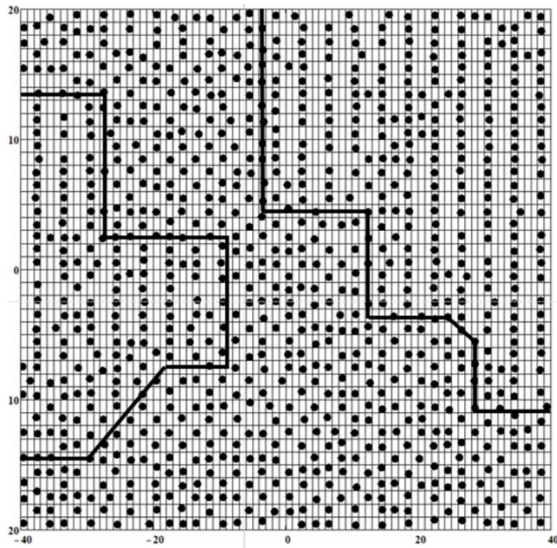


Рис. 2. Співіснуючі фази при надстехіометричному покритті  $\theta_{Li} = 0.275$  мають чітко виділені границі. Це ознака фазового переходу першого роду.  $T = 130$  К.

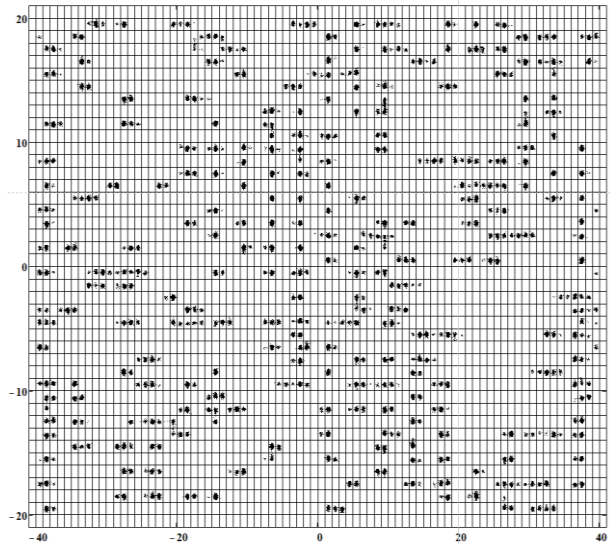


Рис. 3. Утворення стабільних зародків структури  $p(4 \times 1)$  при  $T = 150$  К. Рисунок утворено накладанням послідовного ряду 200 кадрів, що відображає траєкторії атомів. Найбільш стабільними є атоми, які утворюють зародки стехіометричної структури.

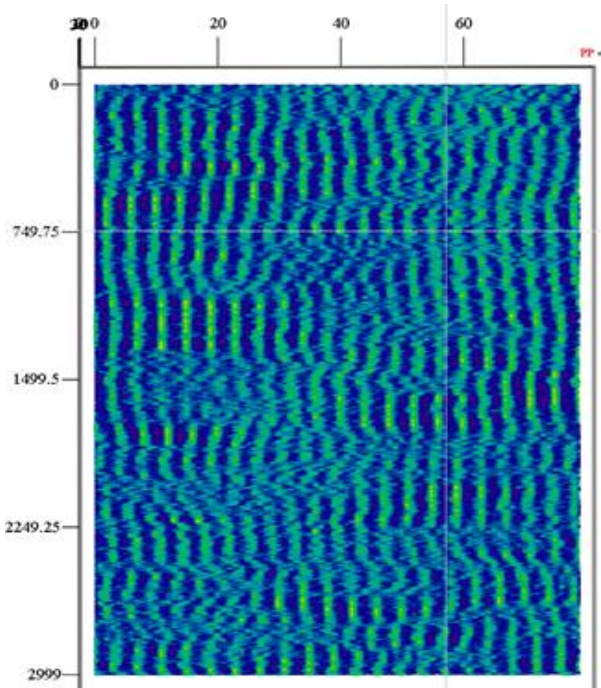


Рис. 4. Еволюція структури вище критичної точки при  $T = 191$  К.  $\theta_{Li} = 0.2$ .

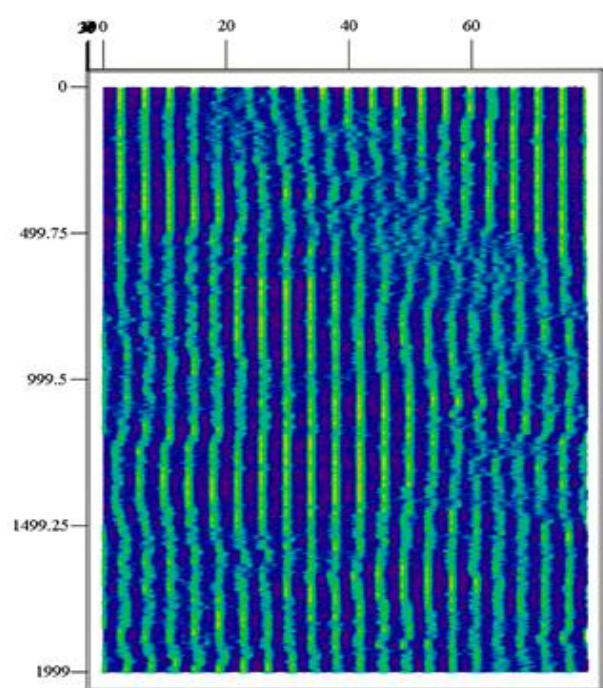


Рис.5. Еволюція структури нижче критичної точки при  $T = 189$  К.  $\theta_{Li} = 0.2$ .

На рис. 3 і 4 показано перехід плівки від стану хаотичного виникнення і руйнації структури  $p(4 \times 1)$  (рис.4) до утворення стабільних у часі острівців цієї структури. Температурний інтервал між рисунками всього три градуси.

**Висновки.** Методом молекулярної динаміки досліджено структурні зміни в процесі плавлення структури  $p(4 \times 1)$ , що виникає при адсорбції літію на гранях (112) вольфраму та молібдену. Показано, що при  $T = 170$  К відбувається перехід першого роду від гетерофазного стану до монофази. Це супроводжується флуктуативним виникненням і руйнуванням острівців когерентної структури в точці переходу системи від стану рідких кристалів до рідини з ближнім порядком.

#### **Література:**

1. Ma, Ming-Yu, Dong Han, Nian-Ke Chen, Dan Wang, and Xian-Bin Li. (2022). "Recent Progress in Double-Layer Honeycomb Structure: A New Type of Two-Dimensional Material" *Materials* 15, no. 21: 7715. <https://doi.org/10.3390/ma15217715>
2. Naumovets, A.G. (2016) *Adsorption of Alkali and Other Electropositive Metals*. Wandelt, K. (ed.) *Surface and Interface Science*, (p. 157-205). Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
3. Fedorus A., Kolthoff D., Koval V., Lyuksyutov I., Naumovets A. G., and Pfnür/ H. Phase transitions in the adsorption system Li/Mo(112) *Phys. Rev. B* 62, 2852 (2000) P. 2852-2861.

**УДК 541.13:544.52:546.21**

### СИНТЕЗ, ФОТО- ТА ЕЛЕКТРОКАТАЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОСТРУКТУРОВАНИХ ПЛІВОК $Y-TiO_2$

**Медик І.А., Воробець В.С., Колбасов Г.Я., Обловатна С.Я.**

*Інститут загальної та неорганічної хімії імені В.І. Вернадського НАН України,  
E-mail: vorobetsvs@i.ua*

Діоксид титану є перспективним матеріалом для застосування в екологічному фотокаталізі, для виробництва електроенергії в сонячних і паливних елементах, газових датчиках, оптичних і захисних покриттях, електрохімічних пристроях, як каталізатор відновлення кисню, тощо. Каталітична активність діоксиду титану значно зростає при його модифікуванні рідкоземельними елементами [1]. У даній статті наведено результати дослідження фото- та електрокаталітичних властивостей електродів на основі наноструктурованих плівок діоксиду титану, модифікованого Y.

Вихідні плівки  $TiO_2$  на підкладці з Ti фольги та плівки, леговані ітрієм ( $Y-TiO_2$ ) із вмістом Y 0,5–5 мол.% синтезовано золь-гель методом з розчинів, що містили прекурсор тетраізопропоксиду титану, а також ацетат ітрію, як модифікатор та тритон X-100, як стабілізуючий агент. Одержані електроди відпалювали на повітрі при 500°C.

Синтезовані матеріали охарактеризовано за допомогою рентгенівської дифракції. Середній розмір наночастинок, розрахований за рівнянням Шеррера, не перевищував 12 нм. Результати РФА показали, що  $TiO_2$  та  $Y-TiO_2$  електроди, кальциновані при 500°C, склалися з анатазу як унікальної фази. Зі збільшенням