

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.А.Н.**

• Мала академія наук  
України під егідою  
• ЮНЕСКО

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



**12-13 ГРУДНЯ 2024 РОКУ**

**Література:**

1. Fedorets S.G., Fedorov S.I., Bozhok I.M., Mazan N.M. *Розвиток Electric Power Supply Sources для Electric Cars "Granite of science"/ Scientific and popular journal (від 03.04.2023.)*

2. Рогоза М.А., Бородай В.А., Нестерова Є.Ю., Кошеленко Є.В., Федоров С.І. *Швидкісне обслуговування тягових акумуляторів сучасних транспортних засобів. Проблеми використання інформаційних технологій в освіті, науці та промисловості: XVII міжнар.конф. (24 листопада 2022 р., Дніпро): зб. наук. пр/ред.кол.: А.А.Азюковський та ін.: М-во освіти та науки України, Нац. Техн. Ун-т «Дніпровська півтехніка». Дніпро: НТУ «ДП», 2022, № 7.С.57-58.*

3. Сліпченко М.І., Письменецький В.А., Гуртовий М.Ю. *Дослідження режимів роботи АКБ та суперконденсатора у системі енергозабезпечення електромобіля. Східно-Європейський журнал передових технологій. 2012, 4/8 (5), с. 31-35.*

**УДК 544.015.4:544.034.5**

**ВИНИКНЕННЯ ТА ЕВОЛЮЦІЯ ЛОКАЛЬНИХ КОЛЕКТИВНИХ ЗБУДЖЕНЬ  
У СУБМОНОШАРОВИХ АДСОРБОВАНИХ ПЛІВКАХ НА ІДЕАЛЬНИХ  
ГРАНЯХ КРИСТАЛІВ**

**Заїка С.О.**

*Інституту фізики Національної академії наук України  
zaikasvetlana@gmail.com*

**Лобурець А.Т.**

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

**Федорус О.Г.**

*Інститут фізики Національної академії наук України  
fedorus.gm@gmail.com*

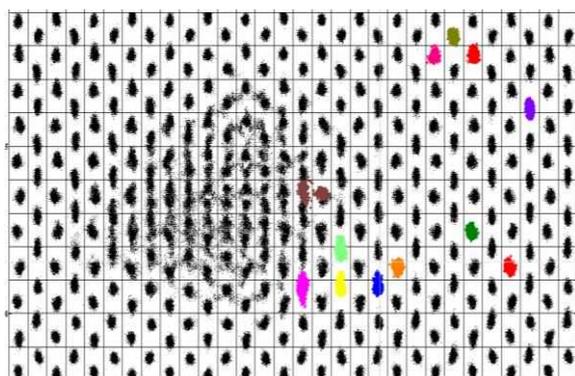
Фазові переходи у світі об'єктів нанометрових розмірів істотно відрізняються від тих, які відбуваються у макросвіті. Особливо це характерно стосовно систем зі зниженою вимірністю. Це двовимірні (2D системи), якими є

субмоношарові адсорбовані плівки на гранях монокристалів тугоплавких металів. Такі плівки здатні дуже сильно дуже сильно змінювати фізико-хімічні властивості поверхні адсорбента [1]. Ця обставина знаходить широке застосування на практиці, але потрібно відмітити, що сьогоденний рівень розуміння процесів на поверхнях різної природи все ще залишається відносно низьким. Отже вивчення можливостей керованого впливу на властивості наноб'єктів має важливе значення для удосконалення існуючих та створення нових нанотехнологій.

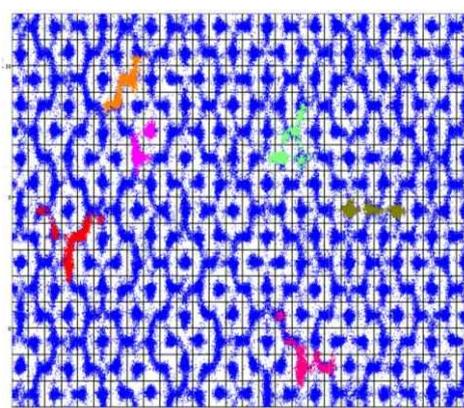
Метою нашої роботи було отримання на атомарному рівні нової інформації про природу фазових переходів у двовимірних адсорбованих плівках із сильно вираженою анізотропією та динамічні особливості реалізації механізмів самодифузії у 2D плівках залежно від їхнього фазового стану, виявлення і вивчення умов існування та властивостей нелінійних, просторово локалізованих коливальних мод великої амплітуди в бездефектних двовимірних рідких кристалах (дискретних брізерів).

Ми досліджуємо на атомарному рівні динамічні процеси, які відбуваються в ультра тонких (менше одного моношару) адсорбованих плівках на ідеальних гранях монокристалів (112) таких тугоплавких металів, як вольфрам і молібден. Адсорбована на таких кристалах плівка літій не викликає деформацію або зміну структури поверхні, що підтверджується результатами інших авторів [2, 3]. При створенні математичної моделі адсорбованих плівок було застосовано метод молекулярної динаміки. Для конструювання потенціалів латеральної взаємодії атомів використано цілком реалістичні параметри взаємодії, одержані в наших ранніх роботах, та запозичені з робіт інших авторів (короткодіюча з потенціальним рельєфом підкладки-адсорбента і далекодіючі потенціали диполь-дипольного відштовхування та осциляцій Фріделя). Міжатомні потенціали, що враховують взаємодії атомів на далеких відстанях не можна зводити до простих ангармонізмів. В ідеалі ДБ у кристалах потрібно вивчатися на основі першопринципних розрахунків, що враховують електронну структуру

речовини. У нашій роботі це зроблено неявно завдяки урахуванню диполь – дипольного відштовхування поляризованих при адсорбції атомів літію та осциляцій Фріделя, які на гранях (112) вольфраму і молібдену у напрямі [111] досягають аномально високих значень [3]. Як демонструють результати наших досліджень, виникнення та еволюція ДБ сильно залежать від ступеня покриття адатомами поверхні адсорбента в області надстехіометричних покриттів. Отже, важливим завданням є вивчення взаємодії ДБ із дефектами 2D кристалічної структури самої плівки при різних покриттях, а також необхідність розгляду пов'язаних завдань, коли враховується взаємодія ґраткових коливань із електронною підсистемою адсорбента. Виявилось, що ймовірність спонтанного виникнення ДБ помітно залежить від геометричних розмірів моделі, тобто, від числа частинок і температури. При низьких температурах така ймовірність знижується, брізери в процесі комп'ютерного експерименту можуть зароджуватися, взаємодіяти один з одним, підсилюватися, слабнути і зникати. У таких ситуаціях дифузія може ставати сильно нелінійною або кусково нелінійною. Останнє означає, що протягом деяких інтервалів часу дифузія є лінійною, тобто, відповідає рівнянню Ейнштейна – Смолуховського, потім швидкість дифузії стрибкоподібно змінюється, що можна інтерпретувати як різку зміну енергії активації самодифузії при незмінній температурі, але частіше такі зміни виявляються досить розмитими у часі. На рисунках нижче ми демонструємо «мандруючий» дискретний брізер (рис. 1), а на рис. 2 чітко видно надструктуру, утворену брізерами. У рідкій кристалічній фазі атоми постійно здійснюють вібрації відносно центрів адсорбції, де енергія їхня енергія є мінімальною. Для створення рисунків застосовано стробоскопічний метод накладання рівновіддалених у часові кадрів.



**Рис. 1.** Мігруючий брізер постійно змінює своє положення у середовищі рідкого кристалу.  
 $\theta_{Li} = 0.75, T=160K$



**Рис. 2.** Надструктура брізерів. Як видно, найбільш ефективно адатоми мігрують по брізерних доріжках (виділено кольором).  
 $\theta_{Li} = 0.95, T=135K$

Висновки. На процеси самодифузії адатомів у некогерентних плівках сильно впливає наявність брізерів. Вони можуть робити дифузю нелінійною, істотно її прискорювати чи гальмувати внаслідок свого руйнування.

#### Література:

1. Zaika S.O., Loburets A.T., Fedorus O.H. *Phase Transitions in Anisotropic Submonolayer Adsorbed Films // Nanomaterials and Nanocomposites, Nanostructures, and Their Applications. NANO 2023. Springer Proceedings in Physics. - 2024. - Vol 253. – P. 397–405.*
2. 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. – Vol. 62. - P. 2852-2861.*
3. Naumovets A.G. *Adsorption of Alkali and Other Electropositive Metals // Surface and Interface Science. – 2016. - P. 157-205.*