

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

**Державний заклад
«Південноукраїнський національний педагогічний
університет імені К.Д. Ушинського»**

МИКИТЕНКО НАТАЛІЯ ОЛЕКСАНДРІВНА

УДК 539.2

**ОПТИМІЗАЦІЯ ФІЗИЧНИХ ТА СЛУЖБОВИХ ХАРАКТЕРИСТИК
ПЕРОВСКІТНИХ ТА ПОЛІМЕРНИХ ТРЕКОВИХ НАНОСТРУКТУР**

01.04.07 – фізика твердого тіла

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Одеса – 2016

Дисертацією є рукопис.

Роботу виконано на кафедрі фізичного та математичного моделювання Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К.Д. Ушинського», Міністерство освіти і науки України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Ків Арнольд Юхимович,
Державний заклад «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К.Д. Ушинського»,
завідувач кафедри фізичного та
математичного моделювання

Офіційні опоненти: член-кореспондент НАН України,
доктор фізико-математичних наук, професор
Литовченко Володимир Григорович,
завідувач відділенням фізики поверхні та
мікроелектроніки Інституту фізики напівпровідників
ім. В.Є. Лашкарьова НАН України

доктор фізико-математичних наук, професор
Вікулін Іван Михайлович,
завідувач кафедри фізики оптичного зв'язку
Одеської національної академії зв'язку ім. О.С. Попова

Захист відбудеться " 05 " травня 2016 р. о " 16:00 " годині на засіданні спеціалізованої вченої ради К41.053.07 при Південноукраїнському національному педагогічному університеті імені К.Д. Ушинського за адресою: 65000, м. Одеса, вул. Старопортофранківська, 26, Аудиторія 52.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К.Д. Ушинського» за адресою: 65000, м. Одеса, вул. Старопортофранківська, 36.

Автореферат розісланий " 31 " березня 2016 року.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради

О.Х. Тадеуш

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Властивості багатьох електронних матеріалів надзвичайно чутливі до їх елементного складу. Це особливо відноситься до наноматеріалів. Прикладом матеріалу, який різко змінює властивості при незначних змінах елементного складу, є перовскіти. Перовскіти використовуються як пасивні діелектрики, п'єзоелектричні перетворювачі, при виготовленні сенсорів і мікро/нано електромеханічних систем. Особливу увагу привертають перовскітні наноструктури.

При зменшенні розмірів матеріалів до наномасштабів стає істотною роль квантових ефектів, поверхні та границь зразка. При цьому змінюються структурні та фізико-хімічні характеристики матеріалів. Так, наприклад, зустрічаються кристали BaTiO_3 , які є кубічними на їх поверхні, але тетрагональними в об'ємі, тобто з двома фазами, розділеними перехідною зоною. Зростання ролі поверхні призводить до зміни співвідношення структурних фаз. Різні фізичні властивості перовскітів, що використовуються при створенні нових електронних приладів, пов'язані, зокрема, з фазовими переходами у цих матеріалах, які, у свою чергу, надто чутливі до їх хімічного складу та розміру зразків. Одержання структур з необхідними параметрами важливо для подальшого розвитку молекулярної електроніки та інших напрямків електронної техніки. Але створення перовскітів з оптимальними службовими параметрами вимагає проведення великої експериментальної роботи та надто складних теоретичних розрахунків. У зв'язку з цим особливе значення має розробка напівемпіричних методів передбачення властивостей перовскітів, зокрема наноматеріалів, з метою їх оптимізації. В останні роки значного поширення набув метод дескриптора, який полягає в знаходженні кореляційних залежностей між комбінаціями легко обчислюваних фізичних характеристик матеріалу і його експериментально вимірюваними службовими характеристиками. Тому знаходження оптимальних дескрипторів та дослідження їх можливостей є важливою актуальною задачею.

Важливі завдання сучасної електронної техніки полягають у модифікації відомих матеріалів і створенні нових наноструктур. Одним з таких напрямків є створення нових наноприладів на основі трекових наноструктур. При опроміненні швидкими пучками іонів діелектричних та напівпровідникових шарів залишаються безперервні зони радіаційної деструкції речовини (так звані приховані треки). Такі зони можуть бути витравлені, так що формуються треки з діаметрами нанорозмірів. Заповнення треків твердим або рідким провідником призводить до формування структури, яку можна розглядати як систему нанодротів. В останній час завдяки незвичайним електрофізичним характеристикам трекової структури знаходять широке застосування. На їх основі виготовляють електронні прилади з унікальними параметрами, в тому числі нові біосенсорні прилади. Нанопористі оксиди металів використовуються для виробництва перовскітів при створенні фотоелементів з безпрецедентною ефективністю перетворення енергії [1*].

Подальший розвиток трекової електроніки вимагає вирішення нових задач. Серед них важливішими є задачі створення треків відповідної форми та з відповідними властивостями внутрішніх поверхонь. Це призводить до необхідності ціленаправлених досліджень механізмів дефектоутворення при взаємодії швидких

іонів з діелектричними шарами. Окрема група задач пов'язана з функціонуванням біосенсорів, виготовлених на базі трекових структур. В цьому випадку необхідно з'ясувати закономірності проходження через треки різних рідин (зокрема, електролітів) саме тому, що в цих процесах виникають фізичні ефекти, які можна використати для ідентифікації шкідливих агентів в сенсорних приладах. Вивчення вказаних фізичних процесів пов'язано з необхідністю проведення різнопланових теоретичних досліджень та створення адекватних моделей.

Зв'язок роботи з науковими програмами. Дисертаційна робота є частиною досліджень, які проводяться на кафедрі фізичного та математичного моделювання ДЗ «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К.Д.Ушинського» та виконуються по наступним темам: «Комп'ютерні та інформаційні методи у природничих та гуманітарних науках» (Державний реєстраційний № 0111U009913); «Покращення радіаційної стійкості Al сплавів, що використовуються як реакторні матеріали» (Державний реєстраційний № 0115U000320).

Мета і задачі дослідження. Метою роботи є розробка адекватних комп'ютерних моделей для вдосконалення властивостей матеріалів сучасної електроніки та демонстрація їх застосування на прикладі перовскітних та полімерних матеріалів.

Для досягнення мети дослідження були сформульовані наступні **задачі**:

1. На прикладі перовскітів продемонструвати можливість передбачення службових характеристик матеріалів електронної техніки шляхом використання метода дескриптора і кореляційних залежностей. Для цього сконструювати адекватний дескриптор, який дозволяє знайти кореляційні залежності електричних властивостей перовскітів від їх елементного складу.
2. Розробити метод кореляційної селекції для виявлення фізичних властивостей матеріалів, які не відповідають необхідним службовим характеристикам. Розробити комп'ютерну програму для автоматизації процедури кореляційної селекції.
3. Модифікувати класичний алгоритм молекулярної динаміки (МД) для моделювання процесів створення та дослідження трекових структур.
4. Використати модифікований алгоритм МД для дослідження особливостей проходження іонного току через трекові структури (ефект пульсацій). Для цього розробити модель ефекту пульсацій, яка описує експериментальні закономірності, що спостерігаються при вивченні полімерних трекових структур.
5. Використати модифіковану МД програму для дослідження механізмів дефектоутворення, що зумовлені дією інцидентних частинок у певному інтервалі енергетичного спектра. Дослідити за допомогою модифікованого алгоритма МД радіаційні ефекти у надпороговій та підпороговій областях енергії у багатоатомних матеріалах.
6. Дослідити за допомогою модифікованого алгоритма МД можливості передбаченого формування кластерних дефектів у багатоатомних матеріалах.

Об'єктом дослідження є перовскітні та полімерні трекові матеріали сучасної електроніки.

Предметом дослідження є електричні властивості перовскітів та полімерних трекових структур.

Для рішення сформульованих задач використано **методи**: комп'ютерне моделювання структури та властивостей матеріалів електронної техніки, модифікований класичний метод МД, кореляційний аналіз, статистична обробка великих баз даних.

Наукова новизна одержаних результатів полягає у тому, що:

1. Розроблено новий комбінований дескриптор, який дозволяє прогнозувати величину іонної провідності перовскітних матеріалів.
2. На прикладі перовскітів уперше запропоновано метод кореляційної селекції, який дозволяє виявляти сполуки з низькою величиною іонної провідності та виключати їх з розгляду. Розроблена комп'ютерна програма для автоматизації даного методу.
3. Запропоновано нову модифікацію класичного методу МД для опису радіаційно-стимульованих процесів.
4. За допомогою модифікованого методу МД встановлено ефект формування так званих «важких кластерів» при іонному бомбардуванні багатоатомних кристалів з масами атомів, що значно відрізняються.
5. Розроблено модель для дослідження ефекту пульсацій іонного току у трекових структурах та встановлено, що виникнення пульсацій току визначається взаємодією токів у треках, незалежно від характеру взаємодії.

Науково-практичне значення одержаних результатів:

1. Розроблено метод кореляційної селекції матеріалів, який реалізовано на прикладі з'ясування впливу елементного складу перовскітів на їх властивості.
2. Запропоновано модифікований метод МД, що становить загальний інтерес. Метод дозволяє встановити внесок різних інтервалів енергетичного спектру інцидентних частинок в остаточний радіаційний ефект.
3. Встановлено ефект формування так званих «важких кластерів» при іонному бомбардуванні багатоатомних кристалів з масами атомів, що значно відрізняються.
4. Розроблено модель проходження іонних токів у трекових матеріалах, що відноситься до загальної проблеми проходження рідини через мембрану.

Обґрунтованість і достовірність наукових результатів підтверджується надійністю методу комп'ютерного моделювання та використання баз даних великого об'єму при розробці моделей; ефективністю методу МД при дослідженні поведінки систем багатьох частинок, задовільним збігом експериментальних результатів з розрахунковими; відповідністю висновків загальноприйнятим уявленням.

Особистий внесок здобувача полягає в тому, що ним безпосередньо:

1. Сконструйовано новий дескриптор для прогнозування величини іонної провідності перовскітів, проведені обчислення значень дескриптора для великої бази даних перовскітних сполук та знайдені кореляційні залежності іонної провідності перовскітів і значень дескриптора.

2. Запропоновано метод кореляційної селекції перовскітів та створена комп'ютерна програма для автоматизації цього методу.
3. Розроблена модифікація методу МД для опису радіаційно-стимульованих процесів шляхом введення в алгоритм Верле «ударної сили» та випадкової функції.
4. За допомогою модифікованого методу МД проведені розрахунки радіаційного дефектоутворення у багатоатомних сполуках у різних інтервалах енергетичного спектру бомбардируючих іонів. Досліджено утворення «важких кластерів» у багатоатомних сполуках з масами атомів, що значно відрізняються.
5. Запропонована модель пульсації іонних токів в трековому матеріалі; створена комп'ютерна програма для реалізації цієї моделі.

Апробація результатів дисертації. Основні результати досліджень, які викладені в дисертаційній роботі, доповідались й обговорювались на наукових конференціях і семінарах: Seminar at the Department of Materials Engineering, Ben-Gurion University of the Negev, Beer-Sheva, Israel, October 15, 2015; NATO Advanced Research Workshop «Nanomaterials for Security», Odessa, Ukraine, 31 August – 3 September, 2015; Шостій Міжнародній науково-практичній конференції «Інформаційні технології та моделювання в економіці», Одеса-Черкаси, Україна, 20 – 22 травня, 2015 р.; 13th International Conference «Information Technologies and Management», Riga, Latvia, April 16 – 17, 2015; 6-й Міжнародній науково-технічній конференції «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології» (СЕМСТ-6), Одеса, Україна, 29 вересня – 3 жовтня, 2014 р.; Международной конференции «Современные проблемы математики и её приложения в естественных науках и информационных технологиях», Харьков, Украина, 1 – 31 мая, 2012 г.; 10th International Conference «Information Technologies and Management», Riga, Latvia, April 14 – 15, 2012.

Публікації. Основний зміст дисертації опублікований у 7 статтях періодичних видань, рекомендованих МОН України для публікації матеріалів дисертацій на здобуття вчених ступенів по фізико-математичним наукам, у міжнародних журналах та у вигляді 5 тез у збірниках праць міжнародних конференцій.

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, п'яти розділів, висновків та списку використаних джерел, що складається із 125 найменувань. Повний обсяг роботи становить 119 сторінок друкованого тексту, що містить 7 таблиць та 34 рисунки.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обгрунтована тематика досліджень, вибір об'єкту та предмету досліджень, обрані методи проведення досліджень. Розглянуті питання наукової новизни та практичного значення одержаних результатів. Наведені дані про апробацію результатів досліджень, особистий внесок автора в одержанні результатів, винесених на захист. Представлена структура дисертації.

У **першому розділі** обговорені актуальні проблеми, пов'язані з надзвичайною чутливістю фізичних та службових характеристик матеріалів сучасної електронної техніки до їх елементного складу. Прикладом матеріалу, який різко змінює

властивості при незначних змінах елементного складу, є перовскіти. Розглянуто властивості перовскітів, які використовуються як катоди твердотільних оксидних паливних елементів та сучасні методи одержання вискоефективних катодів. Щоб досягти бажаних параметрів катодів використовуються так звані «змішані» ABO_3 перовскіти. Для їх виготовлення необхідно знаходити відповідні комбінації катіонів на місцях А і В та їх кількісні співвідношення. Особливу увагу в даний час привертають перовскітні наноструктури. Для багатьох практичних застосувань важливе те, що ці матеріали (наприклад, $SrTiO_3$, $LiNbO_3$) здатні забезпечувати високі транспортні потоки кисню при підвищених температурах. Властивості цих матеріалів особливо чутливі до їх елементного складу. Разом з цим вони є чутливими до змінних параметрів, таких як чистота матеріалу, кількість поверхневих і об'ємних дефектів, розмір зерна. Отже, необхідність контролювати ці параметри є критичним для ефективного контролю якості пристроїв, виготовлених з цих матеріалів.

Якщо розглядати перовскітні наноструктури певного розміру та які вирощені в однакових умовах, виявляється, що їх фізичні властивості головним чином визначаються їх елементним складом [2].* Причому, у разі наноструктур вплив елементного складу на властивості матеріалу значно сильніший, ніж у разі макроскопічних зразків. Таким чином виникає загальна проблема з'ясування залежності фізико-хімічних характеристик перовскітів від їх елементного складу. Знаходження нових шляхів вирішення цієї проблеми є одним з основних завдань дослідження. Дано опис методу *дескриптора*, який в останні роки використовується для передбачення фізичних властивостей складних сполук у залежності від параметрів матеріалу, які легко обчислюються. Описані дескриптори, які розроблені для одержання перовскітів з необхідними параметрами. Обговорені їх можливості і недоліки.

Також у першому розділі розглянуті питання створення і використання полімерних трекових структур у сучасній електроніці. Створення трекових наноприладів вимагає вирішення задач радіаційної фізики, взаємодії швидких іонів з речовиною, вивчення дефектної і електронної структури внутрішніх поверхонь треків, механізмів проходження газів і рідин через треки. Описано сучасний стан досліджень у цих напрямках. В результаті бомбардування діелектричних плівок швидкими іонами виникають безперервні зони радіаційної деструкції матеріалу (так звані латентні треки). Такі зони витравлюють, породжуючи довгі прямі нанопори (треки). Саме такі діелектричні плівки з нанотреками (трекові структури) знаходять все більш широке застосування у сучасній нанoeлектроніці. Розглядаються шляхи створення нових електронних приладів, зокрема нових біосенсорів, на основі трекових структур. При створенні трекових біосенсорів виникає важлива проблема з'ясування механізмів проходження газів та рідин через нанотреки. У випадку полімерних трекових структур проходження іонних токів супроводжується виникненням вуглецевих скупчень (преципітатів) уздовж треків, які можуть вести себе як перешкоди для проходження іонного току. В ряді робіт (наприклад, [3*]) цим явищем пояснюють ефект пульсацій іонного току. Таким чином, виникає задача

визначення реальних причин, що пояснюють ефект пульсацій іонного току, а також з'ясування механізмів формування преципітатів.

У **другому розділі** описано розроблений метод визначення залежності електричних властивостей перовскітів від їх елементного складу. Оксидні матеріали, що проявляють високу іонну провідність, широко використовуються в електроніці при побудові сенсорів, акумуляторів, каталізаторів та катодів твердотільних оксидних паливних елементів. Одними з таких матеріалів є перовскітні структури з узагальненою хімічною формулою ABO_3 , де на місцях А та В розташовані два катіона різних розмірів. Залежно від складових елементів та концентрації кисню перовскіти проявляють різні фізичні та хімічні властивості. Сьогодні перовскітні наноструктури є єдиним прикладом наноструктур у вигляді одноатомного шару з іонним зв'язком, що є важливим при побудові паливних елементів. У дисертації проводились дослідження перовскітних структур з метою пошуку можливості передбачення елементного складу перовскіта з високою іонною провідністю при побудові паливних елементів.

Для одержання необхідних параметрів перовскітів використовуються *ab initio* розрахунки або напівемпіричні методи. Найбільш відомі напівемпіричні методи засновані на концепціях фактора толерантності Гольдшмідта, критичного радіусу, ґратки вільного об'єму, правил Паулінга. Та широке використання набув метод «дескриптора». Дескриптор – це формалізована характеристика матеріала, яка легко обчислюється і разом з тим добре корелює з його певними властивостями. Регулюючи цю характеристику можна змінювати фізичні властивості матеріалу та забезпечувати його необхідні службові параметри. Для конструювання відповідного дескриптора використовуються як геометричні, так і енергетичні характеристики матеріалу. Однак, треба відмітити, що не зустрічається одночасне застосування цих двох факторів при побудові дескриптора. Крім цього, відомі дескриптори в основному спрямовані на передбачення структурної стабільності перовскітів, але не на визначення їх фізичних і хімічних властивостей.

У роботі запропоновано новий комбінований дескриптор виходячи з того, що у всіх відомих дослідженнях (наприклад, [4*]) показано, що геометричні параметри (розміри А і В катіонів, міжатомні відстані), а також енергетичні характеристики (потенціали іонізації А і В катіонів, параметри зонної структури) в значній мірі визначають властивості перовскітів.

Новий дескриптор побудований шляхом використання іонних радіусів (R_A та R_B) і середніх потенціалів валентних електронів (V_A та V_B) для катіонів А і В. У разі змішаних перовскітів (в яких більше одного катіона типу А або В) значення радіусів і потенціали беруться у вигляді середньої величини для атомів, що знаходяться на місцях А і В. Для кожного катіона потенціал іонізації приймається як середнє для всіх електронів, що беруть участь у валентних зв'язках. Дескриптор побудований для відбору сполук з високим рівнем іонної провідності (σ). Аналіз бази даних, що включає 100 перовскітних сполук, показав, що найбільше значення іонної провідності (σ) відповідає випадку, коли $R_A/R_B = 1.5$ та $V_A/V_B = 2$. Фрагмент дослідженої бази даних представлений у таблиці 1. Позначимо відхилення від цих

оптимальних значень через Δ_1 і Δ_2 : $\Delta_1 = |1.5 - R_A/R_B|$ та $\Delta_2 = |2 - V_A/V_B|$. Новий дескриптор записаний у вигляді:

$$\Delta = k\Delta_1 + \Delta_2, \quad (1)$$

де підгоночний параметр k зумовлений нерівним внеском геометричного та енергетичного параметрів атомів А і В у формування властивостей перовскітних сполук.

Таблиця 1

Значення дескриптору Δ та його компонентів, а також іонної провідності перовскітів.

No	Сполука	R_A , pm	V_A , eV	R_B , pm	V_B , eV	Log σ	Δ_1	Δ_2	Δ
1	$\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{Mg}_{0.1}\text{O}_3$	195	802	134	1736.4	-0.5[33]	0.04	0.16	0.24
2	$(\text{La}_{0.72}\text{Nd}_{0.08})_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}_3$	199	802	134	1736.4	-0.6[34]	0.02	0.16	0.2
3	$\text{Nd}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Al}_{0.9}\text{Co}_{0.1}\text{O}_3$	184.5	794.6	125	1662.1	-1.0[33]	0.03	0.1	0.16
4	$\text{Nd}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Al}_{0.9}\text{Si}_{0.1}\text{O}_3$	196	723.1	134	1417.6	-1.0[33]	0.04	0.04	0.12
5	$\text{Nd}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Al}_{0.9}\text{V}_{0.1}\text{O}_3$	196	750	133	1552.3	-1.0[33]	0.03	0.07	0.13
6	$\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{Ga}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}_3$	195.5	803	134	1736.4	-1.0[33]	0.04	0.16	0.24

Примітка. Джерела [33, 34] таблиці 1 приведено у [5*].

Запропонований дескриптор добре корелює з величиною іонної провідності представлених перовскітних сполук при $k = 2$ (рис. 1 та 2). На рис. 2 бачимо перетин двох прямих «log σ - Δ_1 » та «log σ - Δ_2 ». Поблизу точки перетину розташовуються сполуки з оптимальними параметрами.

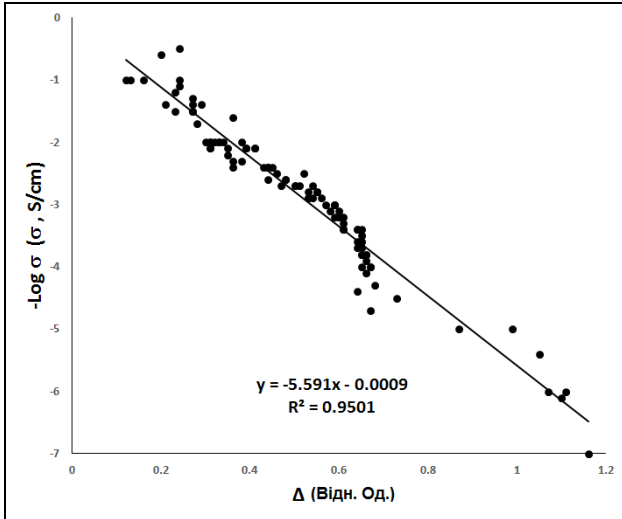
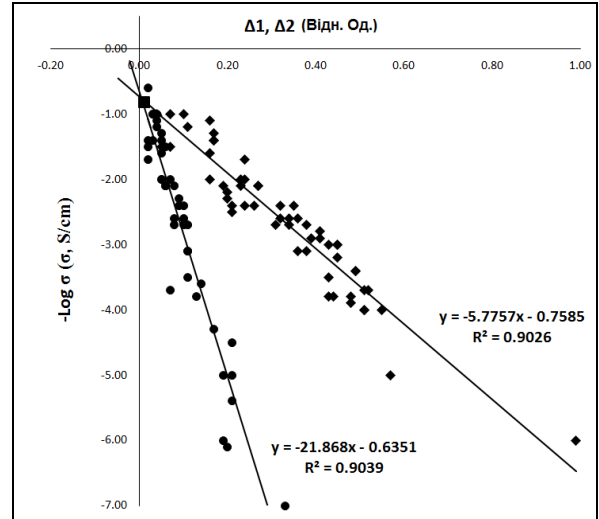
В роботі розроблений метод *кореляційної селекції* матеріалів, який може широко застосовуватись при використанні метода дескриптора. Метод полягає у тому, що з загального набору значень величин, що розглядаються, шляхом перебору виключаються точки, які погіршують кореляцію. Таким чином коефіцієнт кореляції R^2 збільшується. Селекцію проводимо до тих пір, доки одержимо бажаний коефіцієнт кореляції. Далі можна проаналізувати характерні особливості виключених сполук і виявити необхідні зміни елементного складу матеріалу для покращення його характеристик.

У таблиці 2 показано розподіл усіх розглянутих перовскітів на чотири групи, у яких поступово (від першої до четвертої групи) зменшується значення іонної провідності. Чим краще електричні характеристики у групі, тим менше коефіцієнт кореляції. Щоб покращити кореляцію, наприклад, у першій групі, необхідно виключити частину сполук, як це показано у таблиці 3. Ці виключені сполуки відповідають точкам, розташованим найбільш далеко від прямої (рис. 1). Таким чином, залишаються тільки ті сполуки, які дають високе значення коефіцієнта кореляції і мають високу іонну провідність.

Для удосконалення методу кореляційної селекції розроблено комп'ютерну програму, яка автоматизує дану процедуру. Програма виконує послідовно наступні операції:

1. Лінійна апроксимація повного набору точок на основі регресійного аналізу.
2. Обчислення коефіцієнта кореляції.
3. Пошук «найгіршої» точки з повного набору точок методом їх перебору та видалення цієї точки:

- a. Для кожної видаленої точки повторюється лінійна апроксимація точок на основі регресійного аналізу і обчислюється коефіцієнт кореляції для набору точок, що залишився.
 - b. Перебираючи знайдений набір коефіцієнтів кореляції програма знаходить «найгіршу» точку.
4. «Найгірші» точки послідовно видаляються до тих пір, поки коефіцієнт кореляції досягає бажаної величини.

Рис. 1. Кореляційна залежність $\log \sigma$ та Δ .Рис. 2. Кореляційна залежність $\log \sigma - \Delta_1$ (кола) та $\log \sigma - \Delta_2$ (квадрати).

Таблиця 2

Поділення перовскітних сполук на інтервали Δ .

№	Δ	R^2
1	0.24 – 0.38	0.3352
2	0.38 – 0.50	0.6821
3	0.50 – 0.73	0.7887
4	> 0.73	0.8097

Таблиця 3

Кореляційна селекція перовскітних сполук для 1 інтервала таблиці 2.

Видалена сполука	R^2
$(\text{La}_{0.72}\text{Nd}_{0.08})_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}_3$	0.3903
$(\text{La}_{0.9}\text{Nd}_{0.1})_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}_3$	0.7696
$(\text{La}_{0.9}\text{Cd}_{0.1})_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}_3$	0.9066
$(\text{La}_{0.9}\text{Yb}_{0.1})_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}_3$	0.9476

Третій розділ присвячений розробці методичних підходів для дослідження фізичних процесів, пов'язаних зі створенням трекових наноструктур та їх властивостями. Розроблено модифікацію класичного методу МД для вивчення механізмів радіаційного дефектоутворення при взаємодії іонних пучків з діелектричними плівками та для моделювання проходження іонних потоків через трекові наноструктури. Для цього розроблено комп'ютерну програму. Нова модифікація методу МД дозволяє вивчати радіаційні ефекти, що зумовлені певним інтервалом енергетичного спектра інцидентних частинок, тобто окремо надпорогові та підпорогові радіаційні ефекти.

У стандартному методі МД [6*] проводиться чисельне рішення класичних рівнянь динаміки з певним потенціалом міжатомної взаємодії. Модифікація методу МД полягає у додаванні в алгоритмі Верле на етапі розрахунку сили \vec{F}_i так званої «ударної сили», F_{y0} певної частоти і тривалості, що діє на атоми ґратки:

$$\vec{F}_i = -\sum \frac{\partial U(\vec{r}_{ij})}{\partial x_i} + \vec{F}_{y\delta}, \quad (2)$$

де $\vec{r}_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ - відстань між i та j атомами, $\vec{F}_{y\delta}$ - «ударна сила», яка імітує дію інцидентних частинок у певному енергетичному інтервалі (розділ 4) та дію прикладеної напруги (розділ 5).

При шкалюванні «ударної сили» виходили з того, що існує мінімальна енергія, яка необхідна для зміщення атома ґратки в міжвузля при пружному зіткненні, так звана енергія зміщення, E_d . Цю енергію можна записати у вигляді:

$$\frac{(F_{y\delta} t)^2}{2M} = E_d, \quad (3)$$

де t - тривалість удару, $E_d \approx 25-30$ eV – енергія зміщення, M – маса атома ґратки, $F_{y\delta}$ – «ударна сила». Енергія E_d зв'язана з пороговою енергією діючих частинок E_{nop} співвідношенням:

$$E_d = \frac{4m_{инц} M}{(m_{инц} + M)^2} \cdot E_{nop}, \quad (4)$$

де $m_{инц}$ – маса інцидентної частинки, E_{nop} – порогова енергія, E_d – енергія зміщення, M – маса атома ґратки.

«Ударна сила» $F_{y\delta}$ визначає абсолютну величину діючої сили. Вона застосовується одночасно з випадковою функцією, яка виконує три завдання: визначає атоми ґратки, на які діє «ударна сила», визначає напрямок дії $F_{y\delta}$ та значення енергії з певного енергетичного інтервала. Довготривалість та частота дії $F_{y\delta}$ можуть варіюватись. Випадкова функція визначається наступним чином:

$$X_{n+1} = (aX_n + c) \cdot m, \quad (5)$$

де $m = 232$, $a = 214013$, $c = 2531011$, X_0 – будь-яке початкове значення. Ці дані є постійними при використанні випадкової функції середовища програмування, за допомогою якого була створена комп'ютерна програма.

У програмі передбачається також можливість обмежувати напрямки удару просторовим конусом. Кут розчину конуса варіюється. Інтенсивність іонного бомбардування, I у моделі є кількість ударів по модельних частинках, що припадає на один крок при інтегруванні рівнянь руху. Таким чином інтегральна доза, D при іонному бомбардуванні визначається як:

$$I \cdot n = D, \quad (6)$$

де I (уд./крок) моделює інтенсивність іонного потоку, n - загальна кількість кроків при інтегруванні рівнянь руху.

Комп'ютерна програма розроблена на мові програмування C# .Net та з використанням можливостей потужного графічного двигуна Unity3d. Програма має графічний інтерфейс, де відображена динаміка атомів, додаткові вікна з параметрами програми та інформацією про вибрані атоми. Положення і характеристики кожного атома обчислюються за методом МД з використанням алгоритму Верле. Рішення системи рівнянь руху, а також отримання випадкових значень введеної випадкової функції забезпечуються за допомогою класів та методів середовища .Net. Для простеження положення атомів (модельних частинок) та виведення їх на екран монітору використовуються методи графічного двигуна

UnityEngine. Також за допомогою подібних методів встановлюються нові координати та напрямок руху атомів. У програмі введені відповідні коефіцієнти масштабування.

У **четвертому розділі** модифікований метод МД був застосований для дослідження радіаційно-стимульованих процесів у багатоатомних кристалах, до складу яких входять атоми з масами, що істотно відрізняються. Виявлено формування «важких кластерів» у таких кристалах та вивчені закономірності їх утворення. До таких сполук відносяться багато матеріалів, в тому числі реакторні, полімерні матеріали та ін. У полімерних матеріалах значна різниця в масах атомів вуглецю і водню впливає на радіаційно-стимульовані процеси, і це може приводити до формування вуглецевих кластерів. Формування важких кластерів в цих матеріалах істотно впливає на їх фізичні та службові характеристики.

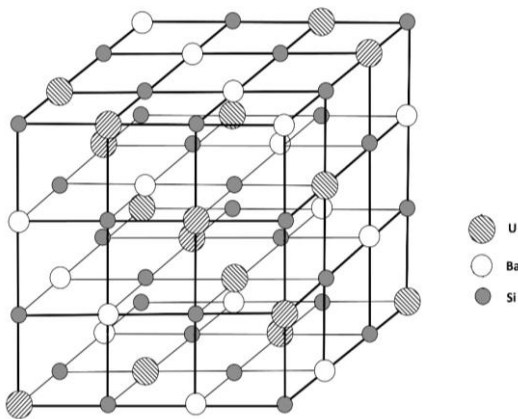


Рис. 3. Фрагмент модельного кристала.

Процесів в кристалах з великою різницею в масах складових атомів. Встановлено, що за допомогою моноенергетичного іонного пучка можна цілеспрямовано створювати певні дефектні структури у таких багатоатомних сполуках. Ці результати є корисними при створенні і дослідженні трекових електронних приладів. Бо властивості трекових пристроїв залежать від форми треків та дефектної структури їх внутрішніх поверхонь.

Для виявлення можливостей розробленого підходу були вивчені особливості утворення радіаційних дефектів у модельних бінарному та трьохатомному кристалах. Розглянемо виявлені особливості на прикладі *модельного трьохатомного кристала*, який піддається бомбардуванню іонами азоту (N^+). Крок інтегрування обраний рівним 10^{-14} с. Комп'ютерний експеримент проводився з використанням модельного кристалу кубічної форми, що складається з трьох різних типів атомів. Була вибрана сполука Si-Ba-U, в якій атомні маси значно відрізняються: Si ($m_1=27$), Ba ($m_2=138$) та U ($m_3=238$). Але вивчався не саме цей кристал, а певна модель, до складу якої входять атоми з різними масами. Фрагмент модельного кристала зображений на рис. 3. Далі позначаємо атоми з різними масами відповідно m_1 , m_2 та m_3 . Кількість атомів у кристалі дорівнювала 9000. При побудові модельного кристалу був використаний потенціал Ленарда-Джонса з відповідними параметрами.

При довгострокових незмінних умовах опромінювання встановлюється стаціонарний розподіл енергії інцидентних частинок. У кожному інтервалі енергетичного спектру цих частинок реалізуються відповідні механізми утворення дефектів. Остаточний вплив випромінювання визначається суперпозицією радіаційних ефектів, викликаних інцидентними частинками зі всіх інтервалів їх енергетичного спектру.

За допомогою комп'ютерної програми проведено вивчення радіаційно-стимульованих

У комп'ютерному експерименті «бомбардування» здійснювалось у двох інтервалах енергій: (I) 34 еВ - 93 еВ та (II) 93 еВ - 142 еВ, що визначаються у відповідності з виразом (4). Іонне бомбардування в інтервалі енергій (I) призводить до зміщення тільки атомів Si, в той час як бомбардування в інтервалі (II) призводить до зміщення атомів Si і Ва.

Було встановлено, що під час радіаційно-індукованих структурних змін в першому інтервалі енергій в результаті розупорядкування підгратки Si «важкі атоми» (U і Ва) утворюють кластери. Кінетика накопичення таких «важких кластерів» m_2 - m_3 відображена на рис. 4.

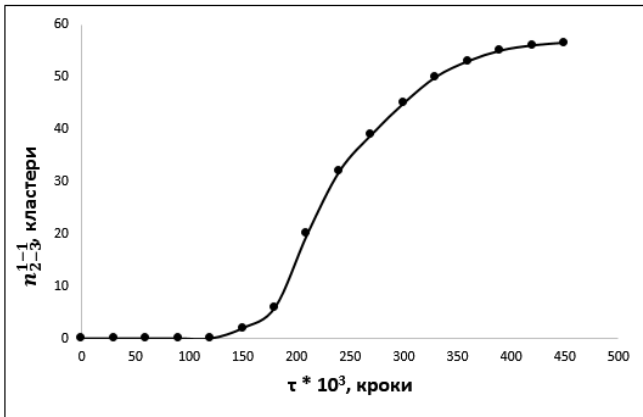


Рис. 4. Кінетика накопичення m_2 - m_3 кластерів в I інтервалі енергій. n_{2-3}^{1-1} – кількість двоатомних кластерів, які складаються з одного атома з масою m_2 та одного атома з масою m_3 .

300 уд/крок та 200 уд/крок. «Інтенсивність» іонного опромінення визначається як кількість ударів, що припадає на один крок при інтегруванні рівнянь руху.

На рис. 6 та 7 показано закономірності формування та руйнування «важких кластерів» в залежності від «інтенсивності» іонного опромінення. На рис. 6 представлена залежність порогової дози формування m_2 - m_3 кластерів від «інтенсивності» опромінення у першому (квадрати) та другому (кола) енергетичних інтервалах. Така майже лінійна залежність означає, що накопичення вакансій «легких» атомів призводить до розупорядкування атомів ґратки, що у свою чергу, змінює положення рівноваги «важких» атомів і призводить до утворення «важких кластерів». На рис. 6 показана також залежність порогової дози формування двоатомних m_3 кластерів від «інтенсивності» опромінення у другому енергетичному інтервалі (трикутники). Нелінійна залежність, яка виявляється в останньому випадку, пояснюється необхідністю попереднього розпаду m_2 - m_3 кластерів при утворенні двоатомних m_3 кластерів. На рис. 7 представлена залежність порогової дози руйнування m_2 - m_3 кластерів від «інтенсивності» опромінення у другому енергетичному інтервалі.

Одержані результати показують, як регулюючи параметри іонного пучка, можна впливати на тип кластерних дефектів, що виникають при іонному опроміненні сполук з масами атомів, що істотно відрізняються. Це означає, що

При бомбардуванні модельного кристала іонами у другому енергетичному інтервалі спостерігаємо подібне формування m_2 - m_3 кластерів, які руйнуються з накопиченням дози, як це можна бачити на рис. 5. У цьому енергетичному інтервалі спочатку відбувається руйнування підгратки Si, що призводить до формування кластерів m_2 - m_3 (U і Ва), та з часом і підгратки Ва. Одночасно з руйнуванням двоатомних кластерів m_2 - m_3 утворюються m_3 кластери. Також отримані результати формування аналогічних m_2 - m_3 та m_3 двоатомних кластерів у разі зменшення «інтенсивності» іонного опромінення до

таким чином можна впливати на дефектну структуру внутрішніх поверхонь треків в полімерних плівках. Звідси також зрозуміло, що виникнення вуглецевих преципітатів в треках полімерних плівок [3*] є наслідком утворення вуглецевих кластерів на їх внутрішніх поверхнях.

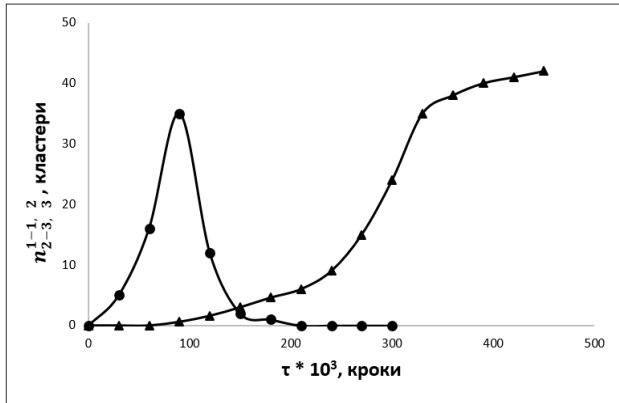


Рис. 5. Кінетика накопичення m_2 - m_3 та m_3 кластерів у II інтервалі енергій при «інтенсивності» іонного опромінення 400 уд/крок. n_{2-3}^{1-1} – кількість двоатомних кластерів, які складаються з одного атома з масою m_2 та одного атома з масою m_3 (кола). n_3^2 – кількість двоатомних кластерів, які складаються з двох атомів з масою m_3 (трикутники).

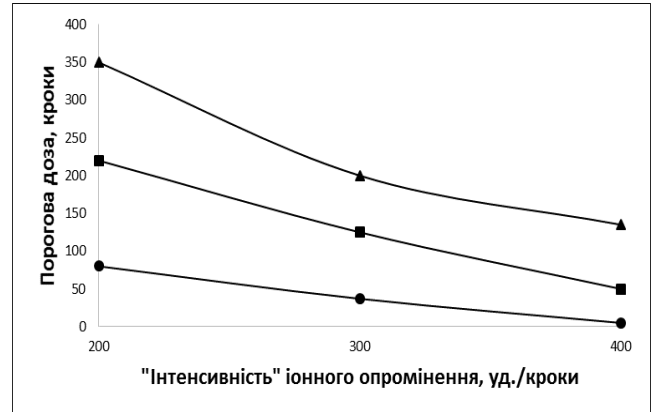


Рис. 6. Залежність порогової дози формування m_2 - m_3 кластерів від «інтенсивності» опромінення у першому (квадрати) та другому (кола) енергетичних інтервалах. Залежність порогової дози формування m_3 кластерів від «інтенсивності» опромінення у другому енергетичному інтервалі (трикутники).

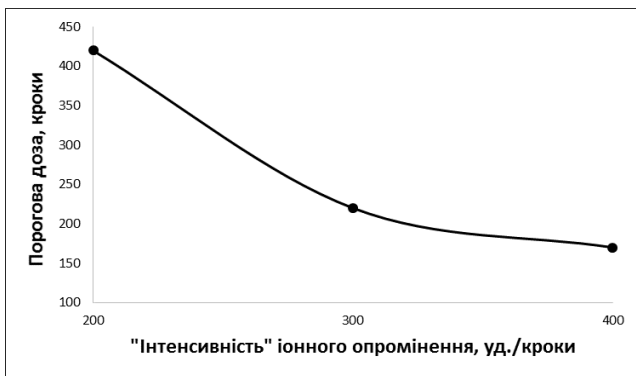


Рис. 7. Залежність порогової дози руйнування m_2 - m_3 кластерів від «інтенсивності» опромінення у другому енергетичному інтервалі.

при створенні біосенсорів. Принципова схема приладу, в якому проявляється ефект пульсацій, показана на рис. 8. Проходження іонного току характеризується незначними коливаннями (рис. 9, I область), але час від часу виникають значні коливання (рис. 9, II область).

Експериментально виявлені такі особливості ефекту пульсацій: характер пульсацій залежить від амплітуди і частоти прикладеної напруги; для виникнення ефекту пульсацій необхідна досить велика щільність треків; величина сплеску току

У п'ятому розділі досліджується ефект пульсацій іонного току при проходженні через трекові структури. Трекові прилади використовуються у сучасній наноелектроніці, медицині, біології, енергетичній промисловості. Ці прилади викликають значний інтерес завдяки їх унікальним властивостям, що не характерні для більшості електронних пристроїв. Одна з властивостей трекових структур полягає у тому, що при проходженні іонного току через треки спостерігається ефект пульсації іонного току. Цей ефект виявляється важливим

зростає з ростом прикладеної напруги; спостерігається екстримальна залежність середньої величини сплеску від частоти прикладеної напруги.

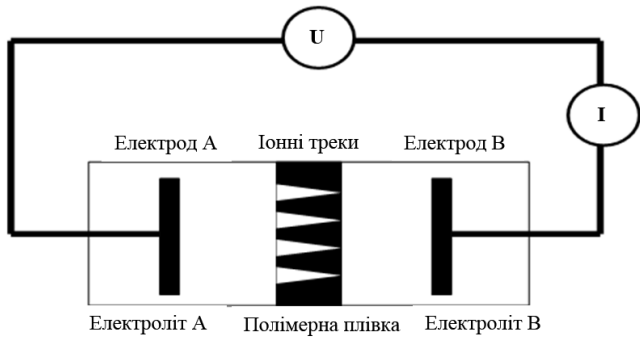


Рис. 8. Принципова схема трекового пристрою.

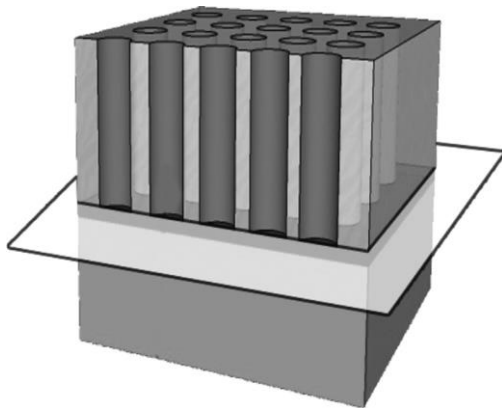


Рис. 10. Ілюстрація до моделі: в площині, яка перетинає треки, є система токів, які коливаються як бачимо на рис. 9.

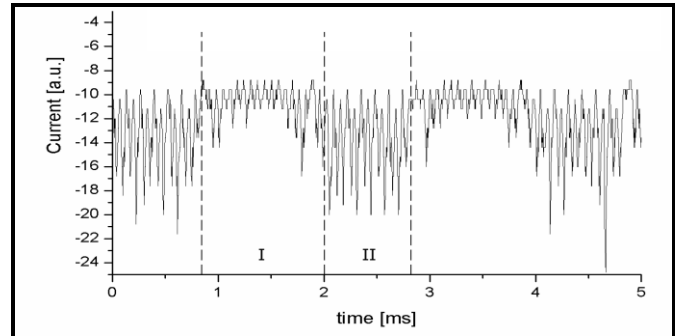


Рис. 9. Пульсації іонного струму у трековому пристрої [7*].

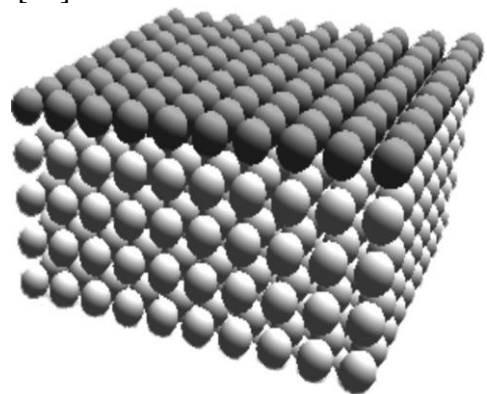


Рис. 11. Модель для пояснення ефекту пульсацій: коливання МЧ у верхній площині імітують коливання струму в площині, що перетинає треки (рис. 10).

У роботі розроблена модель для вивчення ефекту пульсацій іонного струму в треках. Трекова структура представлена у вигляді двовірної системи токів. Дійсно, для будь-якої площини, що перетинає треки (рис. 10), в певний момент часу існують деякі значення струму для кожного треку. Для моделювання такого набору токів була використана двовірна кубічна ґратка, що складається зі 100 модельних частинок (МЧ) (рис. 11, верхній шар), які розташовані у вузлах ґратки. Кожний вузол модельної ґратки відповідає треку. При моделюванні не враховується реальна форма треків. Взаємодія МЧ задається потенціалом Ленарда-Джонса. Параметри потенціала та маси МЧ варіюються таким чином, щоб модельна ґратка без зовнішніх впливів була стабільною. Значення цих параметрів змінювались у межах певного діапазону, щоб визначити їх вплив на поведінку МЧ. Граничні умови для ґратки забезпечуються введенням квазіпружних сил. Нижні чотири шари на рис. 11 складаються з фіксованих частинок та визначають граничні умови знизу для модельної двовірної ґратки. Температура модельної ґратки вводилась стандартним шляхом для МД метода [6*]. Коливання кожної МЧ відповідає коливанню струму у певному треку.

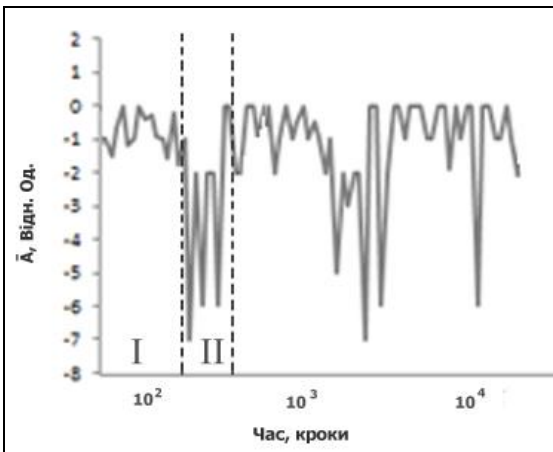


Рис. 12. Ілюстрація сплесків у коливаннях МЧ у комп'ютерному експерименті. На вертикальній осі – середня амплітуда коливань \bar{A} . Зони I і II відповідають тим самим зонам на рис. 9.

рівноваги, але потім ці частинки повертаються у свої вузли. Таким чином для відхилень МЧ від положення рівноваги має місце рис. 12, подібний до рис. 9, що спостерігається в реальному експерименті при пульсаціях іонного току.

Таблиця 4

Відповідність параметрів модельної ґратки параметрам реального приладу.

Середня величина сплеску току	Середня амплітуда осциляцій МЧ
Амплітуда прикладеної напруги	Величина ударної сили
Частота прикладеної напруги	Частота дії ударної сили
Часовий інтервал між сплесками току	Часовий інтервал між сплесками осциляцій МЧ
Поверхнева щільність треків	Щільність вузлів модельної ґратки

Відповідності між характеристиками модельної ґратки та реальним експериментом наведено у таблиці 4. Виходячи з даних відповідностей, було здійснено порівняння теоретичних і експериментальних результатів. Рис. 13а та 13б вказують, що теоретична залежність середньої амплітуди коливань МЧ від величини «ударної сили» якісно узгоджується з експериментальною залежністю середньої величини сплеска іонного току від амплітуди прикладеної напруги. Експериментальні спостереження вказують на характерну залежність середньої величини сплеска іонного току від частоти прикладеної напруги (рис. 14б). Дослідження запропонованої комп'ютерної моделі привели до залежності середньої амплітуди коливань МЧ від частоти дії «ударної сили» (рис. 14а), яка добре узгоджується з експериментальними результатами на рис. 14б.

Характер залежності на рис. 14б можна пояснити впливом «ефекту пам'яті» при виникненні сплесків. Припустимо, що для виникнення сплеску необхідна певна ступінь розупорядкованості модельної ґратки, яка обумовлена дією «ударної сили». Якщо частота дії «ударної сили» велика, модельна ґратка виявляється занадто розупорядкованою після попереднього сплеску. Це погіршує умови формування подальшого сплеску. З іншого боку, в разі малої частоти дії «ударної сили»

модельна гратка наближається до ідеальної, так що умови формування подальшого сплеску знову погіршуються.

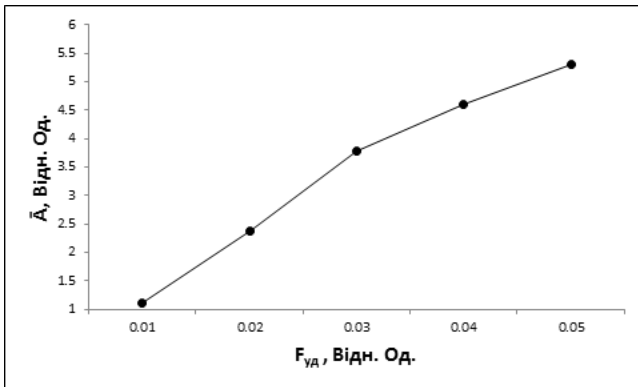


Рис. 13а. Залежність середньої амплітуди коливань МЧ (\bar{A}) від величини «ударної сили» ($F_{уд}$).

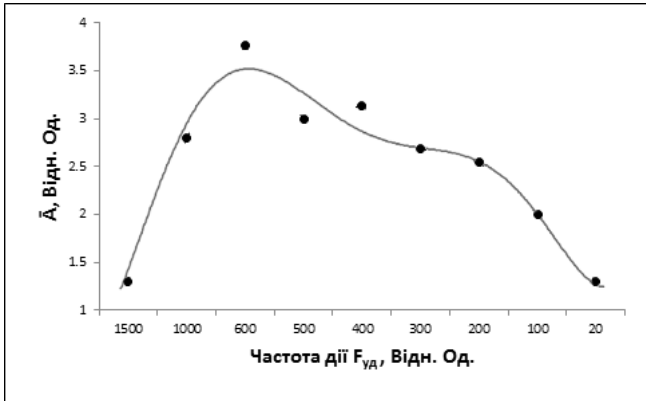


Рис. 14а. Залежність середньої амплітуди коливань МЧ (\bar{A}) від частоти дії «ударної сили» ($F_{уд}$).

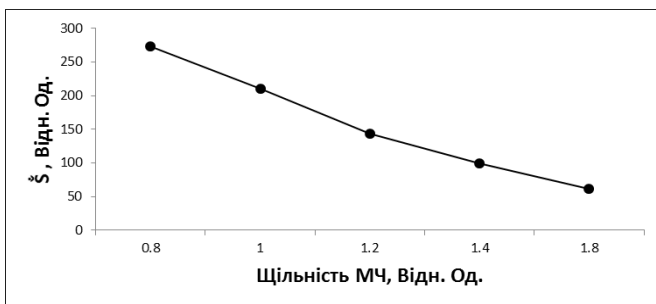


Рис. 15. Залежність середнього інтервала часу між сплесками (\bar{S}) від поверхневої щільності МЧ.

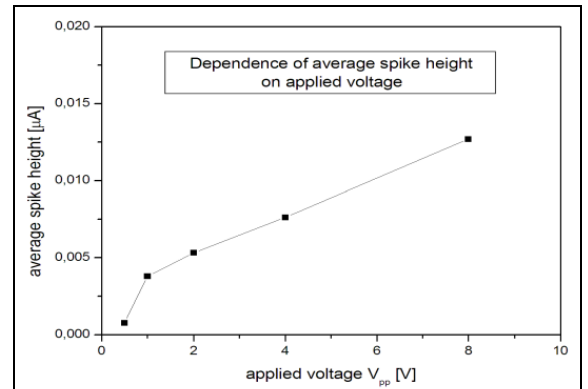


Рис. 13б. Залежність середньої величини сплеску іонного току від амплітуди прикладеної напруги [7*].

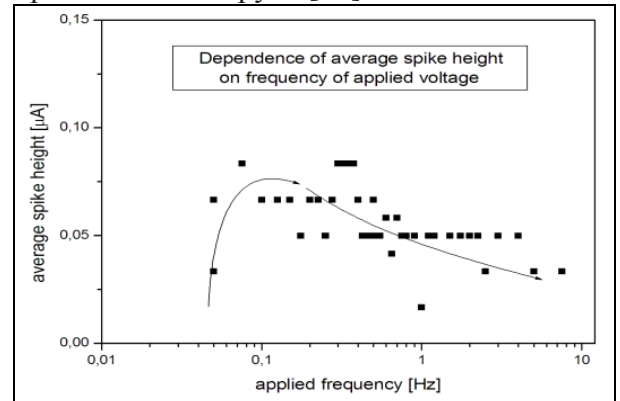


Рис. 14б. Залежність середньої величини сплеску іонного току від частоти прикладеної напруги [7*].

Рис. 15 відповідає експериментальному спостереженню, згідно якому для виникнення ефекту пульсацій необхідна досить велика щільність треків. Видно, що зі зростанням щільності МЧ зростає частота сплесків. При зменшенні щільності МЧ середній інтервал часу між сплесками збільшується, так що поступово вони перестають спостерігатися.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

У роботі розроблені нові підходи для передбачення фізичних і службових характеристик матеріалів сучасної електронної техніки. Способи застосування розроблених підходів продемонстровано на прикладах перовскітних матеріалів та полімерних треківих структур.

При дослідженні електричних властивостей перовскітів:

1. Створені та проаналізовані бази даних у широкому діапазоні іонної провідності перовскітних матеріалів. Аналіз баз даних показав, що особлива чутливість фізичних властивостей від елементного складу характерна для перовскітних наноструктур. Разом з цим вони є чутливими до таких змінних, як чистота матеріалу, число поверхневих і об'ємних дефектів, розмір зерна. Але у випадку перовскітних наноструктур певного розміру і вирощених в однакових умовах їх фізичні властивості головним чином визначаються елементним складом.
2. Сконструйовано новий дескриптор, який дозволяє передбачати величину іонної провідності перовскітних сполук в залежності від їх елементного складу. На відміну від відомих дескрипторів сконструйований дескриптор уперше враховує як геометричні, так і енергетичні характеристики матеріалу і використовується не для прогнозу стабільності матеріалу, а для передбачення його фізичних властивостей, зокрема іонної провідності.
3. Розроблено метод кореляційної селекції матеріалів, який дозволяє удосконалити кореляційний ряд при використанні методу дескриптора. Для автоматизації методу кореляційної селекції матеріалів створена комп'ютерна програма.

При дослідженні процесів створення та шляхів вдосконалення трекових структур:

4. Показано можливість використання методу молекулярної динаміки для моделювання особливостей дефектоутворення в полімерних плівках під дією іонних пучків, а також для вивчення процесів проходження іонних токів через трекові структури. З цією метою розроблено модифікацію класичного методу молекулярної динаміки, в якій до алгоритму Верле введено так звану «ударну силу», що дозволяє моделювати дію певних інтервалів енергетичного спектру інцидентних частинок. Таким чином виникає можливість вивчати роздільно надпорогові та підпорогові радіаційні ефекти в матеріалах.
5. Уперше встановлено, що при іонному бомбардуванні багатоатомних кристалів з атомними масами, що значно відрізняються, виникають так звані «важкі кластери». Це пояснює експериментальний результат, згідно якому при іонному бомбардуванні полімерних плівок з дванадцятикратною різницею атомних мас вуглецю і водню виникають вуглецеві преципітати.
6. Досліджені закономірності утворення важких кластерів при іонному бомбардуванні багатоатомних кристалів з атомними масами, що значно відрізняються. Це відкриває шлях для одержання певних дефектних кластерів на внутрішніх поверхнях треків, що є важливим при створенні трекових пристроїв.
7. Створено модель для дослідження ефекту пульсацій іонного току при дифузії електроліту через систему треків. При цьому використана розроблена модифікація методу молекулярної динаміки. Результати, одержані на базі розробленої моделі, добре узгоджуються з експериментальними закономірностями.
8. Встановлено, що пульсації іонного току у трекових приладах є наслідком колективного ефекту взаємодії іонних токів в окремих треках.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- 1*. Jian Zhang, Yubao Zhao, Xiao Zhao, Zhaolin Liu and Wei Chen. Porous Perovskite LaNiO_3 Nanocubes as Cathode Catalysts for Li- O_2 Batteries with Low Charge Potential. // *Sci. Rep.*, 2014, 4, 6005.
- 2*. Masayuki Maruyama, Hirochika Nakajima, Sunao Kurimura, Nan Ei Yu and Kenji Kitamura. A series of single-crystalline $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{TiO}_3$ ($0 \leq x \leq 1$) perovskite nanoparticle samples. // *Appl. Phys. Lett.*, 2006, 89, 223130/1.
- 3*. Wolfram M.-T., Burger M., Siwy Z.S. Mathematical modeling and simulation of nanopore blocking by precipitation. // *J. Phys. Condens. Matter*. 2010, 22(45), 454101.
- 4*. Lee, Y.-L., Kleis, J., Rossmeisl, J., Shao-Horn, Y., Morgan, D., Environ. Prediction of solid oxide fuel cell cathode activity with first-principles descriptors. // *Energy & Environmental Sci.*, 2011, 4(10), pp. 3966-3970.
- 5*. N. Mykytenko, A. Kiv, D. Fuks. Correlation Selection of Perovskites with Optimal Parameters. // *Adv. Mater. Lett.*, 2016, 7(4), pp. 10-15.
- 6*. Schlick T. *Molecular Modeling and Simulation*. Springer-Verlag, New-York, 2002, p.723.
- 7*. Fink D., Cruz S., Munoz G., Kiv A. Current spikes in polymeric latent and funnel-type ion tracks. // *Rad. Effects Defects Solids*, 2011, 166, pp. 373–388.

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. A. Kiv, N. Mykytenko, D. Fuks, I. Dahan, L. Meshi. Molecular Dynamics probing of the energy spectrum of particles in radiation stimulated processes. // *International Journal of Advanced Computer Technology* 4(6), 2015, p. 81-86.
2. Н.О. Микитенко, А.Ю. Ків, Д. Фукс. Автоматизація методу кореляційної селекції перовскітів. // *Вісник Черкаського університету, серія фізико-математичні науки* № 16 (349), 2015, с. 9-16.
3. D. Fink, A. Kiv, Y. Shunin, N. Mykytenko, T. Lobanova-Shunina, A. Mansharipova, T. Koycheva, R. Muhamediev, V. Gopeyenko, N. Burlutskaya, Y. Zhukovskii, S. Bellucci. The nature of oscillations of ion currents in the ion track electronics. // *Computer Modelling & New Technologies* 2015 19 (6), p. 7-13.
4. Н.О. Микитенко. Новий підхід у використанні молекулярної динаміки для дослідження радіаційних процесів. // *Фізика і хімія твердого тіла т.16* №3, 2015, с.453-457.
5. N. Mykytenko, D. Fink, A. Kiv. Computer modeling of ion current pulsations in track-containing foils. // *Journal of Computational Science*, vol. 6, 2015, p. 34–39.
6. Mykytenko N, Fink D, Kiv A. Generalized model of pulsating track device. // *Computer Modelling & New Technologies* 2014 18(1), p.7-12.
7. N. Mykytenko, Ye. Sedov. Some particular cases of multi-layer feed-forward networks modelling. // *Computer Modelling and New Technologies*, 2011, vol.15, no.4, p. 28–34.
8. N. Mykytenko, T. Maximova, A. Kiv, I. Donchev, I. Kelesh. New MD approach for research the radiation defects in solids. / *Збірник наукових праць Шостої Міжнародної науково-практичної конференції «Інформаційні технології та моделювання в економіці»*. – Одеса-Черкаси, Україна, 20-22 травня 2015р. С.7-8.

9. N. Mykytenko, T. Koycheva, Ye. Sedov, N. Yaremchuk. Data presentation for neural network time series forecasting. / Proc. of the 13th International Scientific Conference «Information Technologies and Management». - Riga, Latvia, April 16-17 2015. P.25.
10. N. Mykytenko. Generalized model of pulsating track device. / Тези доповідей 6-тої Міжнародної науково-технічної конференції «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології». – Одеса, Україна, 29 вересня – 3 жовтня 2014 р. С.56.
11. N. Mykytenko, Ye. Sedov. Data presentation for neural network time series forecasting. / Тезиси докладов международной конференции «Современные проблемы математики и её приложения в естественных науках и информационных технологиях». – Харьков, Украина, 1 – 31 мая 2012 г. С.13.
12. A. Kiv, D. Fink, N. Mykytenko. Forecasting of long-term behavior of multi-track electronic devices. / Proc. of the 10th International Conference «Information Technologies and Management». - Riga, Latvia, April 14 – 15 2012. P.21.

Анотація

Микитенко Н.О. Оптимізація фізичних та службових характеристик перовскітних та полімерних трекових наноструктур. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. – Державний заклад «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К.Д. Ушинського», Одеса, 2016.

Дисертація присвячена розробці нових підходів до прогнозування і оптимізації фізичних та службових характеристик матеріалів сучасної електронної техніки. Розроблені підходи продемонстровані на прикладі перовскітних та полімерних наноструктур.

Розроблено новий комбінований дескриптор для прогнозування складу ABO_3 перовскітів, які не містять перехідних металів та які мають високий рівень іонної провідності. Було встановлено, що найбільші значення іонної провідності розглянутих перовскітів відповідають випадкам, коли співвідношення іонних радіусів $R_A/R_B = 1.5$ та співвідношення потенціалів іонізації $V_A/V_B = 2$. Позначимо відхилення від цих оптимальних значень як Δ_1 і Δ_2 . $\Delta_1 = |1.5 - R_A/R_B|$; $\Delta_2 = |2 - V_A/V_B|$. Запропонований дескриптор вводиться у вигляді $\Delta = k\Delta_1 + \Delta_2$, де параметр k враховує нерівну роль геометричних і енергетичних параметрів A і B катіонів у формуванні складових властивостей. При використанні розробленого дескриптора був запропонований метод кореляційної селекції. Метод виключає з кореляційної серії сполуки з характеристиками, які відрізняються найбільш сильно від оптимальних значень. Для удосконалення методу кореляційної селекції розроблено комп'ютерну програму, що дозволяє автоматизувати дану процедуру.

Розроблено підхід, заснований на принципах класичного методу молекулярної динаміки (МД), що дозволяє досліджувати дію певних інтервалів енергетичного спектру частинок в радіаційно-індукованих процесах. Для того, щоб імітувати ефект пружних зіткнень в обраному інтервалі енергетичного спектру до стандартної схеми МД введена так звана «ударна сила», що діє на атоми ґратки зі сторони падаючих частинок в обраному інтервалі енергій. Нова модифікація МД дозволяє вивчати

незалежно підпорогові та надпорогові радіаційні ефекти в матеріалах та була використана при моделюванні процесів іонного бомбардування багатоатомних кристалів з атомними масами, що значно відрізняються. Таким чином, було пояснено одержання певних дефектних кластерів на внутрішніх поверхнях треків у полімерних структурах. Модифікований метод МД також був використаний для розробки моделі пульсацій іонних токів у полімерних трекових пристроях. Результати, одержані на базі розробленої моделі, добре узгоджуються з експериментальними закономірностями.

Ключові слова: полімерні наноструктури, перовскіти, багатоатомні кристали, радіаційні ефекти, молекулярно-динамічне моделювання.

Abstract

Mykytenko N. O. Optimization of physical and service characteristics of perovskite and polymer track nanostructures. – Manuscript.

Thesis for the degree of candidate of physical and mathematical sciences on specialization 01.04.07 - physics of solids. – South Ukrainian National Pedagogical University after K.D. Ushinskij, Odessa, 2016.

The thesis is devoted to develop new approaches for optimization of physical and service characteristics of materials for modern electronic technique. The developed approaches are demonstrated in respect to perovskite and polymer nanostructures.

A new combined descriptor is constructed to predict the composition of ABO_3 perovskites that do not contain transition metals and have a high level of ionic conductivity. It was found that the largest values of ionic conductivity of considered perovskites correspond to the cases when the ratio of ionic radii $R_A/R_B = 1.5$ and the ratio of ionization potentials $V_A/V_B = 2$. We denote the deviations from these optimal values as: Δ_1 and Δ_2 . $\Delta_1 = |1.5 - R_A/R_B|$; $\Delta_2 = |2 - V_A/V_B|$. The proposed descriptor is introduced as $\Delta = k\Delta_1 + \Delta_2$, where k is a fitting parameter that accounts the unequal role of geometric and energy parameters of A and B cations in formation of properties compounds. When using the developed descriptor, the selection correlation method was proposed. The method eliminates from the correlation series compounds with characteristics that deviate most strongly from the optimum values. The developed approach is improved by the application of a special computer program.

The approach based on the classical molecular dynamics (MD) was developed that allows to probe the energy spectrum of particles in radiation induced processes. To simulate the effect of particles collisions in the selected interval of the energy spectrum the “shock” function is introduced to the standard scheme of MD. A new modification of MD allows to study subthreshold and suprathreshold radiation effects in materials and was used to model the ion bombardment of materials with significantly different atomic masses of constituents. Thus it was explained the phenomenon of carbon precipitates formation on track polymer structures. The modified MD method was also used for the development of a model of the ion currents pulsations in polymer track devices. A good agreement of features of this model with experimental results was obtained.

Keywords: polymer nanostructures, perovskites, radiation effects, molecular dynamics modeling.

Аннотация

Микитенко Н.А. Оптимизация физических и служебных характеристик перовскитных и полимерных трековых наноструктур. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. – Государственное учреждение «Южноукраинский национальный педагогический университет имени К.Д. Ушинского», Одесса, 2016.

Диссертация посвящена разработке новых подходов к прогнозированию и оптимизации физических и служебных характеристик материалов современной электронной техники. Разработанные подходы продемонстрированы на примере перовскитных и полимерных наноструктур.

Разработан новый комбинированный дескриптор для прогнозирования состава ABO_3 перовскитов с высокой степенью ионной проводимости, которые не содержат переходных металлов. Было установлено, что наибольшие значения ионной проводимости рассматриваемых перовскитов соответствуют случаям, когда отношения ионных радиусов $R_A/R_B = 1.5$ и отношения потенциалов ионизации $V_A/V_B = 2$. Обозначим отклонения от этих оптимальных значений как Δ_1 и Δ_2 . $\Delta_1 = |1.5 - R_A/R_B|$; $\Delta_2 = |2 - V_A/V_B|$. Предлагаемый дескриптор вводится в виде $\Delta = k\Delta_1 + \Delta_2$, где параметр k учитывает неравную роль геометрических и энергетических параметров A и B катионов в формировании свойств перовскитов. При использовании дескриптора был предложен метод корреляционной селекции. Метод исключает из корреляционной серии соединения с характеристиками, которые отличаются наиболее сильно от оптимальных значений. Для усовершенствования метода корреляционной селекции разработана компьютерная программа, позволяющая автоматизировать данную процедуру.

Разработан подход, основанный на принципах классического метода молекулярной динамики (МД), который позволяет исследовать энергетический спектр частиц в радиационно-индуцированных процессах. Для того чтобы имитировать эффект упругих столкновений в выбранном интервале энергетического спектра в стандартную схему МД введена так называемая «ударная сила», действующая на атомы решетки со стороны падающих частиц в выбранном интервале энергий. Новая модификация МД позволяет изучать подпороговые и надпороговые радиационные эффекты в материалах, и была использована при моделировании процессов ионной бомбардировки многоатомных кристаллов с атомными массами, которые значительно отличаются. Таким образом, было дано объяснение получения определенных дефектных кластеров на внутренних поверхностях треков в полимерных структурах. Модифицированный метод МД также был использован для разработки модели пульсаций ионных токов в полимерных трековых устройствах. Результаты, полученные на базе разработанной модели, хорошо согласуются с экспериментальными закономерностями.

Ключевые слова: полимерные наноструктуры, перовскиты, многоатомные кристаллы, радиационные эффекты, молекулярно-динамическое моделирование.