

FIRST INTERNATIONAL WORKSHOP

**“ACTUAL PROBLEMS OF FUNDAMENTAL  
SCIENCE”**

**APFS'2015**

Dedicated to 75 anniversary in  
prof.I.D.Olekseyuk

Lutsk – Shatsk Lakes, May 30 – June 03, 2015

**P R O C E E D I N G S**

FIRST INTERNATIONAL WORKSHOP  
**“ACTUAL PROBLEMS OF FUNDAMENTAL  
SCIENCE”**



**PROCESSES; MATERIALS – GROWTH AND  
OPTICAL PROPERTIES”**

3. P. Fochuk, O. Koryukhynko, I. Turkevych, O. Ratschuk, P. Sifert. Defect chemistry in CdTe<math>\langle\text{In}>\text{ crystals}</math> // J. Cryst. Growth. -1999. -V.207. -P.273-277.
4. П.М. Фочук, О.О.Корюкхінко, І.Р. Туркевич, О.З. Панчук. Моделирование высокоотепературного равновесия дефектов в CdTe, легированном In и Ga // Неорганічний матеріал. -2002. -Т.38, №4. -С.435-439.
5. E.S. Nikolayuk, V.Z. Shlyachkovich, M.O. Kovalev, M.I. Kuchma, Z.I. Zakharuk, A.I. Savchuk, I.M. Yurivchuk. «Self-purification effect in CdTe:Gd crystals» // J. Semicond. Phys., Quant. Electronics & Optoelectronics. -2008. -V.11, №1. -P.40-42.
6. Fochuk P., Grill R., Nakonechny I., Korach O., Ratschuk O., Vezhjak Ye., Velas E., Voloshkov A. E., Yang G. and James R. V. Effect of Cd, <math>\langle\text{In}>\text{Te}</math> In crystals appealing on their high-temperature electrical properties // IEEE. Trans. Nucl. Sci. -2011. - Vol. 58, Issue 5. - P. 2346-2351.

## ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ АНАЛІЗУ ОПТИЧНИХ СПЕКТРІВ НАНО – ТА МОНОКРИСТАЛІВ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СПОЛУК

Є.В. Мінов<sup>1</sup>, Л.І. Д'яченко<sup>1</sup>, О.В. Крушко<sup>1,2</sup>, О.М. Кобітович<sup>1</sup>, Ю.Б.

Халавек<sup>1</sup>, С.Е. Остапов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, вил. Коцюбинського

2, м. Чернівці, 58012, Україна; e-mail: u.khalavka@shpl.edu.ua

<sup>2</sup>Бжовинський державний медичний університет, 2. Теліпівська пл., м. Чернівці, Україна, 58002

Описано принцип роботи розробленого авторами програмного забезпечення для аналізу оптичних спектрів напівпровідникових нано- та монокристалів.

**Ключові слова:** оптичні методи дослідження, напівпровідникові матеріали, програмне забезпечення, монокристал, наночастинки.

Враховуючи бурхливий розвиток технології напівпровідникових матеріалів у різних галузях промисловості та наукових дослідженнях постає потреба у точному та швидкому методі вимірювання їх властивостей та опрацювання отриманих даних. Оптичні методи є одними із найбільш розповсюджених та важливих методів для характеристики як об'ємних напівпровідників, так і колоїдних частинок: визначення ширини забороненої зони, розмірів частинок, форми виключен, стану поверхні тощо. У залежності від характеру взаємодії речовини з електромагнітним випромінюванням оптичні методи аналізу поділяють на адсорбційні, які засновані на вимірюванні поглинання речовиною світлового випромінювання (спектрофотометрія, колориметрія, фотоколориметрія, атомно-абсорбційні методи аналізу) та емісійні – засновані на вимірюванні інтенсивності світла, випромінюваного речовиною (флуориметрія, емісійний спектральний аналіз та полум'яна фотометрія). Оптичні методи дозволяють, зокрема, зробити якісну оцінку розподілу наночастинок за розмірами. Наприклад, гострий екситонний пік у спектрі поглинання у

накладку малих НК у фразку. Якщо розподіл за розмірами був широким було би декілька екситонних піків, відповідно до різних енергій для НК різних розмірів і при їх переєквиванні ми б не змогли бачити гострий екситонний пік у спектрі поглинання, а лише широкий і невиразний край абсорбції.

Метою даної роботи є створення математичної програми CrystalAnalyzer та апробація створених алгоритмів в опрацьованих спектрах оптичного поглинання колоїдних розчинів напівпровідникових наночастинок CdS та CdTe.

Програма дозволяє завантажувати спектри виміряні за допомогою будь-яких спектральних приладів, у форматі текстового файлу, що містить дані колонки даних – довжину хвилі та інтенсивність поглинання чи фотолумінесценції.

Робота з програмою розпочинається із обрання файлу спектра німлоко "Read chat data from file", після чого значення довжини хвилі та інтенсивностей зчитуються з файлу і відображаються на 4-х графіках на головному вікні програми (рис. 1) в 4-х системах координат: [A,D], [E,D], [E,(D\*E)^2], [E,(D\*E)^0.5] відповідно. У випадку оновлення даних є можливість повторного завантаження раніше відкритого файлу спектру за допомогою кнопки "Reload current chats". Для кожного з графіків передбачено 2 способи вказання меж аналізу спектру:

7. виділення потрібного регіону мишкою на потрібному графіку;
8. введення точних мінімального і максимального значень меж по вісі X в діалоговому вікні за допомогою кнопки "Dims" в шапці графіку.

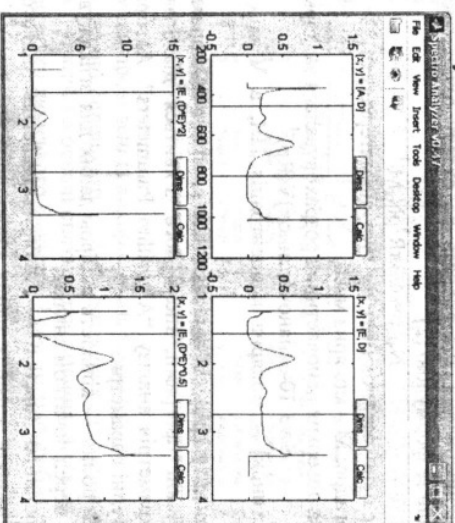


Рис.1. Вікно огляду завантажених спектрів

Однією із основних проблем при опрацьованні спектрів оптичного поглинання є неточність визначення краю оптичного поглинання др, що

визначають графічним способом за перетином дотичної до довгохвильового краю спектральної характеристики оптичного поглинання. Точність визначення  $\lambda_{pr}$  складає не менше  $\pm 1$  нм.

Усі подальші розрахунки по визначеному значенню ширини забороненої зони, розміру частинки, числа агломерації та питомої поверхні наночастинок проводяться із використанням графічно визначеного значення краю поглинання за допомогою наступних виразів:

$$\lambda_p = hc/E_g \quad (1)$$

де  $\lambda_p$  – довжина хвилі краю поглинання, нм;

значення  $h$  – сталої Планка ( $4,135 \cdot 10^{-15}$  еВ·с),  $c$  – швидкості світла ( $3 \cdot 10^8$  м/с)

одержано вираз:

$$\lambda_{pr} = 1242 \text{ (eВ/м)/} E_g \quad (2)$$

що використовувався для розрахунку  $E_g$ ;

розмір частинки розраховували за допомогою математичних виразів [1]:

$$R = (h \mu \Delta E_g)^{1/2} \quad (3)$$

де  $R$  – максимальний радіус частинки СдС (нм),  $\mu = (m^* - 1) + (m^* - 1)^{-1}$ ,  $h$  – постійна Планка ( $h = 4,135 \cdot 10^{-15}$  еВ·с),  $m^* = 0,21 m_e$ ,  $m^* - 0,8 m_e$  – ефективні маси електронів та дірок в СдС,  $m_e$  – маса спокою електрона ( $m_e = 9,1093 \cdot 10^{-31}$  кг),  $\Delta E_g$  – різниця значення ширини забороненої зони наночастинок та масивного кристалу СдС (2,4 еВ);

число агломерації наночастинок СдС, тобто кількість формульних одиниць у нанокристалі, що входять до складу однієї частинки NCdS, розраховували за формулою [2]

$$N_{part} = 4/3 \pi R^3 \rho N_A M^{-1} \quad (4)$$

де  $R$  – радіус наночастинок (нм),  $\rho$  – густина матеріалу ( $4,82 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>);  $N_A$  – число Авогадро;  $M$  – молярна маса;

питома поверхня наночастинок розраховувалася за формулою:

$$S = 3 \cdot 10^{-3} [\text{наночастинок}] V (R \rho)^{-1} \quad (5)$$

де [наночастинок] – молярна концентрація НЧ, а  $V$  об'єм реакційної суміші [3].

Запуск аналізу графіків здійснюється кнопкою "Compare data", на головному вікні програми, після чого з'являється діалогове вікно для введення параметрів аналізу "Algorithm Parameters". Алгоритм дозволяє вказати наступні параметри:

- Smooth points — кількість вибірок даних для згладжування вхідних даних перед початком аналізу;
- Desconvolution function — вибір задалегідь підготовленого або завантаження з файлу даних еталонного спектру на основі якого відбувається дековолюція вхідних даних;
- Step Func. Thresh — поріг довжини хвилі по якому розраховується дековолюція вхідних даних;

- Epsilon — коефіцієнт екстинкції на довжині хвилі Lambda

Результати аналізу виводяться на вікно результатів (рис. 2) у вигляді кількох графіків і таблиці зі знайденими значеннями екстремумів і обчислених на основі них наближених значень середнього діаметра частинки і концентрації розчину. Алгоритм при аналізі використовує тільки дані у вказаному у головному вікні програмі діапазоні, для отримання кращих результатів перед аналізом рекомендується виділяти межі як умога наближені до бажаного регіону спектра. Номери графіків відповідають номерам графіків із вхідними даними спектрів на головному вікні програми і будуються на відповідних системах координат. П'ятий графік відповідає дековолюції вхідних даних за методикою та алгоритмом наведеними в [4]. Також в програмі передбачена можливість наділізу окремо кожного графіку з головного вікна програми для цього в нижній частині графіків передбачено кнопку "Calc".

Результати обчислень, за допомогою кнопки "Export to excel", можна експортувати в файл Ms. Excel для подальшої роботи.

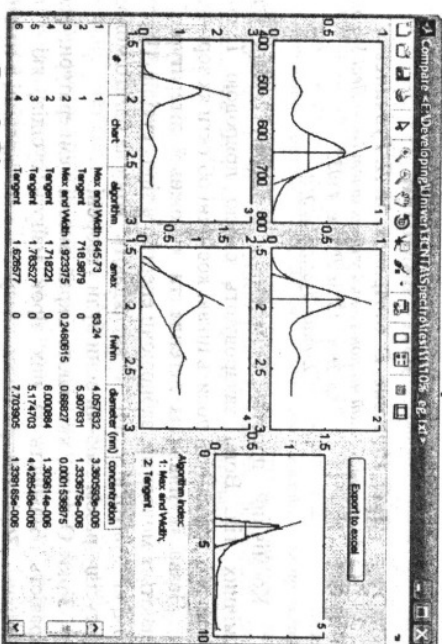


Рис. 2. Вікно виводу результатів аналізу спектрів.

Розрахунки проведені із використанням запропонованого програмного забезпечення значно спрощують роботу дослідника та розширюють число розрахованих функцій на основі спектру поглинання, а також виключають можливість помилки людського фактору. Крім того, обробка одного і того ж спектру може надати цілу низку цікавої інформації, і таким чином надання аналізу в одній програмі дозволяє заощадити час та забезпечує можливість порівняння та підбору оптимального алгоритму аналізу.

Публікація підготовлена в ході виконання досліджень за проектом «Розробка програмно-аналітичної системи для дослідження параметрів нано- та мікробієктив колоїдних розчинних та твердих тіл» за фінансової підтримки МОН України.

#### Список використаних джерел:

1. Хайрутдінов Р.Ф. Хімія полупровідникових наночастиц / Р.Ф. Хайрутдінов // Учені хімія. — 1998. — Т. 67. — С. 125—139.
2. Походенко В. Д. Фотохімічне поведіння наночастиц сульфідів кадмію в присутстві востановителів / В. Д. Походенко, С.Я. Кучий, А.В. Коржан // Теорет. і експерим. хімія. — 1996. — Т.32, №2. — С. 102—106.
3. Фотоперенос електрона между наночастицами Sds и CdTe в коллоидных растворах / М.И. Болдирчук, М.В. Коваленко, А.Д. Строек, С.Я. Кучий // Теорет. і експерим. хімія. — 2004. — Т. 40, № 5. — С. 279—284.
4. Dots Segels, J. Matthew Lucas, Robin N. Klupp Taylor, Marcus Scheele, Naimeí Zhong A. Paul Alivisatos, and Wolfgang Peukert Determination of the Quantum Dot Band Structure Dependence on Particle Size from Optical Absorbance and Transmission Electron Microscopy Measurements//ACS Nano. — 2012. — P. — 9021-9032.

#### ЗОРІ – ВАМПІРИ

**Т. С. Науменко, В. О. Арнох, М. Д. Рубчинська**

Східноєвропейський національний університет імені Леся Українки

пр. Воли, 13, м. Луцьк, 43035

E-mail: [oxosa@ukr.net](mailto:oxosa@ukr.net)

Космічний простір безмежний. В ньому зустрічається безліч космічних тіл. Вони зачаровують своєю природою і поволіженими Хотілося б розглянути досить цікаві космічні об'єкти як зорі – вампіри.

Назва їх пішла із легенди та художньої літератури, де які зорі пишануться молодими, забираючи енергію в зірок сусідів. Ці зорі – вампіри відомі як “голубі відстали”, і “виглядають” вони на багаті молодшими і ніж свої сусіди, разом з якими вони були утворені.

Зірки О типу, які мають вкрай високі температури, велику масу і яскравість. Більшість із цих зірок мають сусідів, які і є зорями вампірами. Зорі спектрального класу О – найяскравіші в нашій Галактиці Вони як мінімум в 15 разів більші за Сонце і до мільйона разів яскравіші нього. Температура поверхні таких зірок досягає до 30 тисяч градусів Цельсія, і вони випромінюють біло-білакитне світло.

Життя таких зірок досить коротке, але при цьому дуже активне Закінчують своє життя великим вибухом з послідовним розсіюванням різних хімічних елементів. Як і впливають на хімічний склад галактик. При житті вони випромінюють досить потужний зоряний вітер, який запобігає утворенні нових зірок. Саме тому парні системи з такими зірками досить рідке явище.

Зорі перетягують на себе газ з іншої зірки сусідки і тим збільшують

мас своєю існування. Зірка – жертва – втрачаючи більш холодний водневий шар, не може стати червоним гігантом, і здається гарячішаю і білакитнішаю.

Це явище і є явищем вампіризму. Одна зірка існує за рахунок сусідньої зірки, забираючи своєю гравітацією газ з поверхні іншої. І тому продовжує своє існування.

1. <http://www.newstka.com/word/30/jul2012/vampirar.html>
2. <http://www.sciencemag.org/content/337/6093/444.abstract>

#### ЗМІНА СТРУКТУРИ АМОРФНИХ СЛАВІВ ПІД ДІЄЮ ЛАЗЕРНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

**Никируй Ю. С.<sup>1</sup>, Жовнерук С.В.<sup>1</sup>, Рибіцькі Я.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Львівський національний університет імені Івана Франка, кафедра фізики металів,

вул. Курчака і Мерфойда, 8, 79005, Україна

E-mail: [szholnietgk@gmail.com](mailto:szholnietgk@gmail.com)

<sup>2</sup> Донський технологічний університет, факультет прикладної фізики і математики, Полтава

Робота присвячена дослідженню структурних змін, що відбуваються в аморфних металевих сплавах на основі заліза під дією лазерного випромінювання. Встановлено, що за допомогою лазерного випромінювання можливо модифікувати структуру аморфних стрічок шляхом лазерно-індукованих локальних змін структурних параметрів, формувати аморфно-нанокристалічні композиції, та контролювано змінювати властивості цих матеріалів.

Ключові слова: аморфні металеві сплави, аморфно-нанокристалічні композиції, лазерне опромінення.

Аморфні металеві сплави (АМС) завдяки своїм унікальним властивостям давно привертають увагу дослідників. Особливий інтерес становлять сплави, в яких під дією різного роду факторів формується нанокристалічна структура. До таких факторів відносять нагрівання, потужну вибірку, деформатію, високоенергетичне випромінювання, тощо. Водночас, особливості структурних перетворень, кінетика кристалізації, фазовий склад та структурні особливості наночастинок, що кристалізуються з аморфної матриці під дією високоенергетичного випромінювання, в тому числі лазерного, потребують подальших експериментальних досліджень, оскільки зазначені процеси протікають в сильно нерівноважних умовах нагрівання - охолодження, що ускладнює їх вивчення теоретичними методами, а також створює перешкоди для процесу самоорганізації, та формування нового типу структур.

Кешин А.Г., Семенов Т.А. Вплив складу скла на спектрально-люмінесцентні характеристики іонів рідкоземельних елементів.....	136
Коровацький А., Чокі Д., Качан Ю., Колядинський І., Сахарчук В. Морфогенез пилко карбону отриманих магнетронним легуванням.....	138
Королишин А.В., Мудрий С.І., Штаблявий І.І. Експериментальні дослідження системи (PbTe)(Bi <sub>2</sub> Te) <sub>1-x</sub> .....	142
Кривинський А., Кірик І., Урбан О. Дослідження п'єзоелектричного ефекту у тетрамерних халькогенідах Ag <sub>2</sub> Ga <sub>2</sub> Se <sub>8</sub> .....	145
Купоров В. Узагальнена гідродинаміка багатокомпонентних нейтральних та іонних рідин.....	147
Купоров В. Колективна динаміка багатокомпонентних систем, узагальнені колективні моли матрична теорія збурень.....	152
Литвин М.А., Мудрий С.І. Вплив інтерстабільності на поверхневий напіг розбавлених розчинів Sn <sub>1-x</sub> Ni <sub>x</sub> .....	157
Литвиш В.В., Хашиш М.В., Селешня І.Р. Енергетичні співвідношення в електроматнітному полі.....	158
Луцьов С.В., Бурбан О.В., Назарчук П.Ф., Зміч А.І. Енергія іонізації мільких донорів в L <sub>1</sub> та L <sub>2</sub> моделі p-Ge.....	160
Маханець О.М., Кушак А.І. Спектри квазічастинок у багатошаровій відкритій напіпровідникової нанотрубі.....	161
Махецький С.В., Турчук С.В., Науменко Т.С., Галушка М.А., Богданюк М.С. Дисперсія.....	165
Мельничук Л., Захарук З., Раренко І., Фуртас І., Овод А., Солодін С., Фочук П. Властивості калійної телуриду, легovanого Ge.....	166
Мінов Є.В., Дяченко Л.І., Кручко О.В., Кобитович О.М., Халавко Ю.Б., Остапов С.Е. Пропаганда забезпечення для аналізу оптичних спектрів нано- та монокристалів напіпровідникових сполук.....	170
Науменко Т.С., Артюх В.О., Рубчинська М.Л. Зорі - вапшири.....	174
Нижирій Ю.С., Жовнерук С.В., Рабицький Я. Зміна структури аморфних сплавів під дією лазерного випромінювання.....	175
Новосад О.В., Божко В.В., Парасюк О.В., Божко Н.А., Кажукаускас В. Перспектива використання монокристалів CuIn <sub>2</sub> X <sub>2</sub> ZnIn <sub>2</sub> X <sub>2</sub> (X=Se, S) та Cd <sub>0,98</sub> Zn <sub>0,02</sub> Te як поглинаючого шару фотоелектропротекторів.....	176
Пирота С.А. Дієрні орбіти в моделі бора і структура t-мезонів.....	180
Понеділок Г.В., Клавчук М.І. Спектр і хвильові функції квантової точки у зовнішньому магнітному полі.....	184
Романюк Ю.А., Яремко А.М., Юхимчук В.О. Електрон-фононна та електрон-електронна взаємодія в раманівських та спектрах поглинання кристалів.....	190
Сахнюк В.Є., Пастух О.Ю., Штукельський А.М. Вплив домішок на ефекти фазової корентності в надіпрвідних контактах типу SIS.....	192
Франчук Л.Ю., Данилюк І.В., Івашченко І.А., Галай В.В., Стрельчук В.В., Насека Ю.М., Олексюк І.Д. Оптичні властивості монокристалів Ga <sub>0,5</sub> In <sub>0,5</sub> Si <sub>5</sub> S <sub>8</sub> .....	193
Фурман В. Моделювання термомеханічних процесів в зоні активної взаємодії кори та мантії землі.....	197
Хашиш М.В., Дашинський Л.В., Фелосов С.А. Методи дослідження позовжненього і погречного п'єзоопору в кристалах кремнію.....	201

Шваліковський Д. М. Темна матерія у згніченій гравітації.....	387
Шваб О.В., Жак О.В., Кулик Ю.О., Венгрин Е.М. Структурні властивості AlN-шпівів системи AlN-Ni <sub>2</sub> Ni.....	401
Шитирин П., Дашук Ю., Свізінський А., Токварук Ю. Квантові властивості станів у джозефсонівських контактах.....	408
Шитирин П., Дашук Ю., Дмитрук І. Безліткена динаміка в джозефсонівських контактах.....	409
Яремко Ю. Динаміка реактивності заряду в пастій рідині.....	412
SECTION 2. FUNDAMENTAL PROBLEMS OF CHEMISTRY AND PHYSICS.....	413
Nembraga M., Levytskyu V., Vaidzyskyu V., Kotur V. The Se-Mn-C system in the phase equilibria and crystal structures of compounds.....	417
Kogut U.M., Kogut O.R., Shrak O.O., Oleksyuk I.D., Rybachuk I.V., Foryuk I.V., Pucinskyi K.I. Phase equilibria in the Ag <sub>2</sub> Se-PbSe-GeSe <sub>2</sub> system.....	420
Fochuk P., Ranshuk O., Nukovnyk Ye., Solodin S. The energy level of the doubly negatively charged sradium vacancy in the CdTe GAP.....	423
Мілян П.М., Кун А.В., Мілян Ж.И., Товт В.А. Получение слоистого сверхрешетки Pb <sub>2</sub> TeO.....	427
Березнюк О.П., Климочев О.С., Кривинський А.С., Мирончук Г.Л., Зміч О.Ф., Олексюк І.Д. Властивості склокерамік у системі Cu <sub>2</sub> Se-SnSe.....	429
Божан Ю.В., Квас В.М., Гайворонська А.О., Дорошко Т.С. Визначення температур феруму за допомогою індикаторного паперу у природних та технологічних водах.....	432
Грабовський В.А., Демидченко О.С., Катеринчук І.М., Луцьов С.З., Грушчинська О.М. Моделювання міграції радіонуклідів у ґрунті.....	436
Івашченко І.А., Данилюк І.В., Галай В.В., Стрельчук В.В., Колядинський В.С., Науменко В.З., Насека Ю.М., Гулай Л.Д., Олексюк І.Д. Напіпровідникова сполука та стевія, що утворюється в системах A <sub>2</sub> Sn <sub>3</sub> -La(Pb) <sub>2</sub> S <sub>3</sub> -ErTe <sub>2</sub> у Ho <sub>2</sub> S <sub>3</sub> де A <sup>III</sup> - Ga, In.....	441
Кормош Ж. Нові матеріали для потенціометричних сенсорів.....	444
Кормош Ж., Станкевич Ю., Корольчук С., Корольчук С., Савчук Т., Боромола С. Хемосенсори на основі алінополіхідних родамінів.....	445
Кормош Ж., Станкевич Ю., Корольчук С., Савчук Т., Кормош А. Потенціометричні мембранні сенсори для визначення речуту.....	446
Левковець С.І., Олексюк І.Д., Фочук П.М., Федорчук А.О., Хижин О.Ю., Шекуч Л.В., Пісчак М.Ф., Парасюк О.В. Системи TlIn <sub>1-x</sub> Hg <sub>x</sub> Te (Na-Cl-Br-I).....	247
Лютий П.Я., Федорчук А.О. Частковий ізотермічний перехід діаграми стану системи Dy <sub>2</sub> Sa-Al при 870 К (0,25-0,50 ат. % Dy).....	252
Махецький С.В., Турчук С.В., Науменко Т.С., Галушка М.А., Богданюк М.С. Проблема космічного сміття навколо землі.....	254
Олексюк І.Д., Івашченко Н.М., Марчук О.В., Гулай Л.Д. Фазові рівноваги у системі E <sub>2</sub> S <sub>3</sub> -ZnS-Ga <sub>2</sub> S <sub>3</sub> за температури 770 К.....	256
Олексюк І.Д., Парасюк О.В., Пісчак Л.В., Гулай Л.Д., Івашченко І.А., Марчук О.В., Строк О.М., Горут Г.П., Мазурець І.І., Мозолов М.Ю., Козар В.Р., Данилюк І.В., Левковець С.І., Блашко Н.М., Цесар О.В., Колядинський В.С., Смітлох О.В., Оніщук Т.І., Мельничук Х.О., Березнюк О.П., Фочук К.С., Вронська О.І., Кудряч О.О., Чернюшок О.І., Назарчук О.А., Батюк Ю.Ю., Клімук О.С., Свістак О.В. Фізико-хімічний аналіз і класифікація хімічних сполук.....	259