

Таблиця 2 – Температура початку кипіння спиртових розчинів при різних тисках у досліді 2

Концентрація спирту, %	Тиск, кг/см ²				
	0,0	0,5	1,0	1,5	2,0
40	85,7	95,0	105,2	112,3	117,9
30	88,0	98,0	106,8	114,1	119,0
20	90,1	99,7	108,8	115,0	122,2
10	93,7	102,4	112,0	118,8	123,9

Отримані результати показують зростання температури кипіння розчину при зниженні концентрації спирту та зростанні тиску в системі, що цілком логічно та закономірно й узгоджується з теоретичними даними. Статистична похибка експерименту становить $\pm 0,9$ °C (середня різниця результатів - $0,06$ °C, стандартне відхилення різниць $\sigma = 0,88$ °C), що є нормальною точністю для теплотехнічних дослідів із кипінням, особливо при зміні тиску.

Важливими результатами проведених дослідів є визначення нижнього порогу кипіння для спиртових розчинів різної концентрації та підтвердження можливості використання установки в наукових дослідженнях. Розроблена установка та методика експерименту будуть корисними для подальшого вивчення інших теплоносіїв.

УДК 538.971 + 538.915 + 539.213 + 519.688

**УТВОРЕННЯ СТРУКТУР І ПОВЕРХНЕВА ДИФУЗИЯ В СУБМОНОШАРОВИХ
СПІВАДСОРБОВАНИХ ПЛІВКАХ LI-SR НА ГРАНІ ВОЛЬФРАМУ (112)**

Заїка С.О., аспірантка
Інститут фізики НАНУ
zaikasvetlana@gmail.com

Лобурець А.Т., к.ф.-м.н., доцент
Національний університет «Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»
Федорус О.Г., д.ф.-м.н., пров. наук. співроб. відділу фізичної електроніки
Інститут фізики НАНУ

Метою нашої роботи є одержання на атомарному рівні нової інформації про процеси дифузії та структуроутворення в співадсорбованих субмоношарах лужних і лужноземельних елементів із сильно вираженою анізотропією їхньої латеральної взаємодії, що залежить від хімічної природи адатомів, потенціального рельєфу підкладки та ступеня заповнення грані адсорбованими атомами.

Вичерпної відповіді на ці питання не можуть дати ні термодинаміка, ні найсучасніші експериментальні методи дослідження. Рівноважна термодинаміка взагалі не цікавиться шляхами переходу системи від стану 1 до стану 2 і має серйозні обмеження стосовно мінімального розміру ансамблю частинок, а сучасні методи експериментальних досліджень ще не дають можливості досліджувати згадані процеси в режимі реального часу. На сьогодні одержати відповідь на поставлені питання можна лише застосовуючи створення математичних моделей для проведення комп'ютерних експериментів. Але застосування математичних моделей має сенс лише після їхньої верифікації на основі результатів, одержаних у реальних фізичних експериментах. Нами за участі кафедри комп'ютерних та інформаційних технологій і систем вдалося створити математичну модель, яка дозволяє враховувати міжатомні взаємодії всіх відомих типів латеральної взаємодії: а) взаємодія колективу адатомів з потенціальним рельєфом підкладки; б) притягальна взаємодія, що

описується потенціалом типу Ленарда-Джонса; г) фріделевські осциляції. Для адаптації нашої моделі під конкретні асорбційні системи Li-Mo(112) та Sr-Mo(112) нами використано результати робіт [1-7].

При здійсненні верифікації ми опиралися на результати спільних робіт, виконаних авторами, що належать різним науковим школам (США, Україна, Німеччина) [1, 2]. Її експериментальна частина була реалізована в Інституті фізики НАН України Федорусом О. Г. завдяки застосуванню методу дифракції повільних електронів (ДПЕ). Цей метод дає можливість спостерігати за змінами структури асорбованої плівки зі зміною температури та ступеню покриття на реальних гранях монокристалів. Ці грані майже завжди містять певну кількість дефектів різного характеру. Область когерентності низько енергетичних електронів порядку 100 ангстрем, тобто кількість атомів, за якими ведеться спостереження, при максимальному заповненні грані не перевищує 1-2 тис. Відмітимо, що час ресстрації дифракційної картини вимірюється секундами, тоді як реальні зміни координат адатомів внаслідок дифузії здійснюються за фемтосекунди. Для нас основним результатом вищезгаданої роботи була повна фазова діаграма, побудована в координатах “ступінь покриття – температура”, яка засвідчувала сильну залежність температури фазового переходу від ступеня покриття. Нагадаємо, що ступінь покриття – це відношення кількості адатомів до кількості адсорбційних центрів на грані кристалу - адсорбента. В комп'ютерних експериментах ми не враховували взаємну деполяризацію адатомів з ростом ступеню покриття. Відмітимо, що ці експерименти здійснювалися на ідеальній грані, тобто вільній від будь-яких дефектів. Незважаючи на перелічені спрощення, в області низьких покриттів (менше 1/3 моношару) комп'ютерні експерименти показали кількісну подібність до результатів, одержаних методом ДПЕ, і якісну подібність в області всього моношару. Негативний вплив дефектів реальної грані в експерименті з ДПЕ відмічали самі автори роботи [1]. Нам вдалося продовжити фазову діаграму в області низьких покриттів і показати, що зародки структури літію $p(4 \times 1)$ утворюються вже при покриттях $\theta \approx 0,05$.

Ми зупинимося на дослідженнях властивостей співадсорбованих плівок Li-Sr-W(112) за допомогою комп'ютерного експерименту. Раніше такі дослідження нами були проведені в реальних умовах із застосуванням скануючого контактного потенціального мікроскопа з високою роздільною здатністю [5]. За результатами цих експериментів була висунута гіпотеза про те, що “швидкі” адатоми літію можуть захоплюватися ланцюжками структури $p(7 \times 1)$ “повільних” атомів стронцію і навіть утворювати в ланцюжках $p(7 \times 1)$ суцільні фрагменти ланцюжків як літію, так і молібдену. Зараз ця гіпотеза була блискуче підтверджена на атомарному рівні у наших вже комп'ютерних експериментах. Про це можна судити спираючись на результати, представлені на рис. 1 - 3. На рис. 1 показано один із $5 \cdot 10^{-6}$ кадрів. На ньому чітко виділяються ланцюжкова структура стронцію $p(7 \times 1)$, на фоні якої літій намагається сформувати свою власну структуру $p(4 \times 1)$. Ці структури конкурують між собою. Окрім того, у ланцюжки стронцію влітаються не лише окремі адатоми літію, але й цілі групи, тобто великі фрагменти ланцюжків літію. Краї цих фрагментів ефективно закріплюються атомами стронцію, що надає гібридним ланцюжкам додаткову стабільність. На цьому рисунку ми показуємо сукупність геометричних місць точок перебування центрів адатомів протягом деякого довільного вибраного інтервалу часу. Стробоскопічний ефект відображає імовірність перебування атомів на поверхні ідеальної грані (112) і є повним аналогом того, що відображає метод ДПЕ. Окремо відмітимо, при стехіометричному покритті стронцію, яке відповідає структурі $p(7 \times 1)$ і покриттю 0.143 моношару, ланцюжки літію вже не спостерігаються. Це означає, що «чисті» ланцюжки стронцію термічно є більш стабільними, ніж гібридні (рис. 2) Розгортка в часові усереднених покадрово координат атомів (Рис. 3) демонструє високу стабільність ланцюжків стронцію при температурах нижчих за критичну.

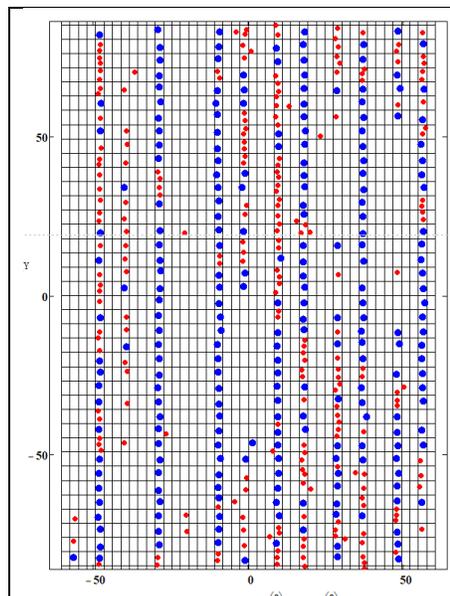


Рис. 1. Співіснування структур $p(7 \times 1)$ та $p(4 \times 1)$

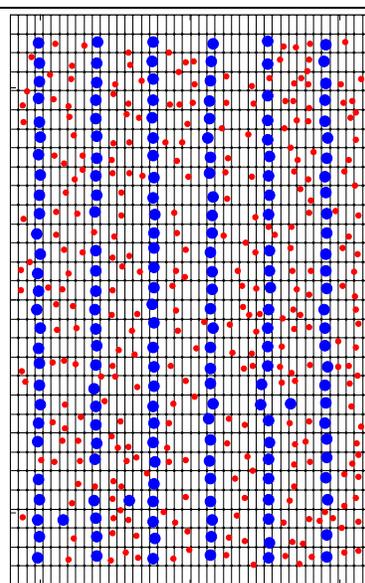


Рис. 2. Великі диски – атоми Sr, малі - Li

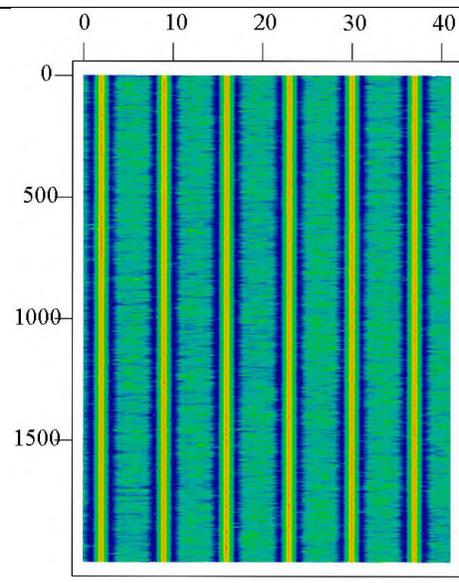


Рис.3 Розгортка в часові усереднених координат атомів

Весь літій затискається між ланцюжками стронцію, перебуваючи при цьому у стані двовимірного решіткового газу. Цей газ ефективно стабілізує структуру $p(7 \times 1)$ стронцію, суттєво підвищуючи її термічну стабільність. Адатоми літію здійснюють коливання між ланцюжками стронцію, але можуть переміщуватися і вздовж ланцюжків.

Література:

1. Fedorus A., Godzik G., Koval V., Naumovets A., Pfnür H. Phase transitions in two-dimensional anisotropic chain systems: submonolayers of Sr adsorbed on Mo(112) // *Surface Science*. — 2000. — No. 1–3. — P. 229–242.
2. Fedorus A.G., Lyuksyutov I.F., Kolthoff D., Koval V., Naumovets A.G., and Pfnur H. Orientational phase transitions in a lithium overlayer on Mo(112) // *Europhys. Lett.* – 1999.- № 48, Vol. 4. – P. 442-448.
3. Loburets A. T., Naumovets A. G., Vedula Yu. S. Surface diffusion of lithium on (011) face of tungsten // *Surface Science*. — 1982. — Vol. 120, № 2. — P. 347–366.
4. Zaika, S.O., Loburets, A.T., Fedorus, O.H. (2024). Phase Transitions in Anisotropic Submonolayer Adsorbed Films. In: Fesenko, O., Yatsenko, L. (eds) *Nanomaterials and Nanocomposites, Nanostructures, and Their Applications. NANO 2023. Springer Proceedings in Physics*, vol 253. Springer, Cham. P. 397 - 405
5. Loburets A.T. Influence of coadsorbed strontium atoms on surface diffusion in lithium submonolayer films on tungsten (112) face / A.T. Loburets, S.A Zaika, A.G. Naumovets // *Ukr. J. Phys.* – 2012. – Vol. 57, № 6.– P. 661–669.
6. Medvedev V. K., Naumovets A. G., Smereka T. P. Lithium adsorption on the (112) face of tungsten // *Surface Science*. — 1973. — Vol. 34. — P. 368–384.
7. Lyuksyutov I., Naumovets A. G., Pokrovsky V. *Two-Dimensional Crystals*. — Boston : Academic Press, 1992. — 342 p.