

Міністерство освіти і науки України
Північно-Східний науковий центр НАН України та МОН України
Національний університет
«Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»

Тези

74-ї наукової конференції професорів,
викладачів, наукових працівників,
аспірантів та студентів університету

Том 2

25 квітня – 21 травня 2022 р.

Полтава 2022

issledovanie antioksidantnyih svoystv melatonina [Electrochemical study of the antioxidant properties of melatonin]. Dopovidi NAN Ukraini. 2009; 9:160–164. (Russian).

4. Solovyova NV, Kuznetsova TY. Quantum chemical modeling of antioxidant activity of glutathione interacting with hydroxyl- and superoxide anion radicals. *Ukr. Biochem. J.* 2015; 87, 2:156-162.

УДК 004.94:534.16

С.О. Заїка, аспірантка,
Інститут фізики НАН України
А.Т. Лобурець, к.ф.-м.н., доцент,
Національний університет
«Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»

УТВОРЕННЯ ДВОВИМІРНИХ СТРУКТУР ТА КООПЕРАТИВНІ ЕФЕКТИ В АДСОРБОВАНИХ СУБМОНОШАРОВИХ ПЛІВКАХ: ГІПОТЕЗИ Й ЕКСПЕРИМЕНТИ

Метою наших наукових пошуків є встановлення фізико-хімічних закономірностей, що проявляються в процесі поверхневої дифузії в субмоношарових адсорбованих плівках на поверхні кристалів тугоплавких металів. Всі ці об'єкти з точки зору термодинаміки є нерівноважними і відкритими системами. До них без застережень можна застосувати основні положення синергетики. В досліджуваних об'єктах у процесі еволюції відбувається зниження ентропії як наслідок структуризації плівки. Дійсно, як показують виконані нами експериментальні роботи і результати комп'ютерних експериментів по вивченню еволюції створених нами математичних моделей, процеси самоорганізації за певних умов проявляються надзвичайно яскраво і різноманітно в кооперативних ефектах у процесах двовимірної дифузії залежно від індивідуальних особливостей адсорбційних систем та термодинамічних умов. Одним з найбільш цікавих і важливих для практичного застосування об'єктів нелінійної фізики є хвилі солітонного типу. Вони є яскравим прикладом локалізації енергії у двовимірній системі. Зростає інтерес до дискретних нелінійних систем і утворення динамічних солітонів [1, 2].

Натурні експерименти, теоретичне обґрунтування одержаних результатів, вироблення робочих гіпотез у разі неможливості одержання деяких результатів за допомогою прямих експериментів та їхня верифікація здійснювалася в комп'ютерних моделях, побудованих нами на молекулярному рівні з урахуванням реальних значень потенціалів латеральної взаємодії.

Експериментальне вивчення кооперативних властивостей до сьогодні залишається достатньо складною в плані технічної реалізації задачею. Основна проблема полягає в складнощях реєстрації багаточастинкових ефектів, які протікають з величезними швидкостями [2]. Це робить їх вивчення у натурних експериментах практично неможливим. Такі явища як рух краудіонів і солітонів, коливання нелінійної локалізованої моди або рекомбінація вакансій і міжвузловинних атомів відбуваються з фемтосекундними швидкостями. У цьому випадку дуже ефективним

виявляється метод комп'ютерного моделювання. Комп'ютерне моделювання зараз є таким же широко визнаним методом дослідження як і експериментальні та теоретичні методи. З його допомогою на атомному рівні можна ефективно досліджувати не лише надзвичайно швидкі процеси, а й більш тривалі за часом. За допомогою комп'ютерної моделі можна перевірити теоретичні розробки та пояснити і спрогнозувати явища, які ще не висвітлені повною мірою іншими методами дослідження. У своїй роботі при створенні моделі для дослідження швидкоплинних процесів у субмоносарових адсорбованих плівках ми використали метод молекулярної динаміки. Для вирішення наших задач він має ряд переваг у порівнянні з іншими. Кінематика атомів тут описується за допомогою рівнянь Ньютона. Це дозволяє найбільш реалістично моделювати різні процеси в ідеальних кристалічних структурах та реальних, які містять різні дефекти. У теоретичних роботах, як правило, розглядаються ланцюжки атомів у наближенні, яке враховує взаємодію лише найближчих частинок. Але ж часто в кристалах сили міжатомної взаємодії можуть бути далекодіючими. Наприклад, адсорбовані атоми лужних чи лужноземельних елементів на гранях (110) та (112) на вольфрамі і молібдені утворюють за певних умов довгоперіодні структури. Вичерпна інформація про такі структури та причини їх утворення приведена у монографії [3]. У нашій ранній роботі [1] була висловлена гіпотеза про те, що у співадсорбованих плівках літію та стронцію (обидва елементи зазнають диполь-дипольного відштовхування, причому більш сильним є потенціал взаємодії адатомів стронцію) адатоми літію можуть вбудовуватися в ланцюжкові структури стронцію. У випадках захоплення ланцюжками стронцію цілих фрагментів ланцюжків літію, останні зазнають колективних локальних збуджень. При цьому надлишкові до стехіометричної концентрації атоми літію перебувають у газовій фазі.

Література

1. Loburets A.T., Zaika S.A., Naumovets A.G. Influence of coadsorbed strontium atoms on surface diffusion in lithium submonolayer films on tungsten (112) face // Ukr. J. Phys. – 2012. – Vol. 57, № 6. – P. 661 – 669.
2. Браун О.М. Модель Френкеля-Конторовой. Концепции, методы, приложения / О.М. Браун, Ю.С. Кившарь. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 536 с.
3. Lyuksyutov I.F. Two-dimensional crystals / Lyuksyutov I.F., Naumovets A.G., Pokrovsky V.L. - Boston: Academic Press, 1992. - 423 p.

УДК 546.226/131/175/657

Н.В. Бунякіна, к.х.н., доцент

О.Г. Дрючко, к.х.н., доцент

«Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»

ПОДВІЙНІ СУЛЬФАТИ, ХЛОРИДИ, НІТРАТИ НЕОДИМУ І АМОНІЮ

Розвиток високих технологій сприяє застосуванню лантаноїдів та їхніх сполук. На основі лантаноїдів одержують багато унікальних матеріалів, котрі знаходять широке застосування у різних галузях науки і техніки. Сполуки