ПОЛТАВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
імені В.Г. КОРОЛЕНКА

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

викладачів, аспірантів, магістрантів і студентів фізико-математичного факультету

Полтава – 2013

УДК 378.6(063)(072):[51+53+004]
ББК 22.3я43+22.1я43

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ

Ю.Д. Москаленко – декан фізико-математичного факультету, доцент (головний редактор);

О.П. Руденко – завідувач кафедри загальної фізики і математики, професор;

О.С. Мельниченко – професор кафедри математичного аналізу та інформатики;

Л.І. Яковенко – завідувач кафедри політекономії, професор;

Т.М. Барболіна – завідувач кафедри математичного аналізу та інформатики, доцент (заступник головного редактора);

О.П. Кривцова – доцент кафедри математичного аналізу та інформатики;

О.А. Москаленко – доцент кафедри загальної фізики і математики;

О.В. Саєнко – доцент кафедри загальної фізики і математики.

Відповідальність за грамотність, аутентичність цитат, правильність фактів і посилань несуть автори статей.

Збірник наукових праць викладачів, аспірантів, магістрантів і студентів фізико-математичного факультету [Текст] / ПНПУ імені В.Г. Короленка; редкол.: Ю.Д. Москаленко (голов. ред.) та ін. – Полтава: ТОВ "АСМІ", 2013. – 400 с.
ISBN 978-966-182-235-0

До збірника увійшли основні результати наукових досліджень викладачів, аспірантів, магістрантів і студентів фізико-математичного факультету за 2012 рік.

Дана добірка корисна для науковців, учителів і студентів фізико-математичних факультетів.

УДК 378.6(063)(072):[51+53+004]
ББК 22.3я43+22.1я43

ISBN 978-966-182-235-0

© ПНПУ імені В.Г. Короленка, 2013
© ТОВ "АСМІ", оформлення, 2013

Анізотропія фізичних властивостей у нанокристалах

Марина Бичко, Валерія Гаврилова, Владислав Сухомлин, Андрій Шурдук

1. Анізотропія поверхневої енергії . Як відомо,величина поверхневої енергії для нанокристалів істотно залежить від орієнтації поверхні нанокристала [1]. Питома поверхнева енергія межі нанокристала з будь-яким середовищем анізотропна або, іншими словами, залежить від кристалографічної орієнтації даної границі.

Основний внесок до поверхневої енергії дають зв'язки найближчих сусідів. Якщо в площині поверхні знаходиться максимальна кількість найближчих сусідів, тоді таку поверхню перетинає мінімальна кількість хімічних зв'язків.

При невеликому відхиленні від площини щільної упаковки, поверхня нанокристала може бути представлена сходинками – незавершеними атомними шарами. Висота сходинок може бути різною, найменша міжатомна відстань a, відстань між сходинками λ залежить від кута θ відхилення від площини щільної упаковки:

$$h / \lambda = tg\theta .$$

Оскільки на торцях незавершених атомних шарів з'являються додаткові розірвані хімічні зв'язки, то питома енергія віцинальної поверхні буде більшою за енергію щільно упакованої грані.

2. Поверхневий натяг і поверхнева напруга. У загальному випадку поверхневий натяг і поверхнева напруга не ідентичні. Особливий випадок маємо тоді, коли величина γ не залежить від малої деформації. Це реалізується тільки тоді, коли система може вільно перебудовуватися у відповідь на збурення, тобто у випадку рідини. У твердому тілі ненульові поверхневі напруги послаблюються іншими шляхами. Якщо похідна $\partial\gamma / \partial\varepsilon$ від'ємна, тоді можна очікувати утворення атомних дислокацій і пружної повздовжньої деформації поверхні.

Поверхневий натяг γ можна розглядати як надлишок вільної енергії, віднесеної до одиниці площі. Порівнюючи деформацію повзучості з відомими зовнішніми силами, можна визначити поверхневий натяг. Тоді можна записати:

$$\gamma = E_{зв}\left(Z_s / Z\right)N_s ,$$

де $E_{зв}$ – об'ємна енергія зв'язків, Z_s / Z – відносне число зв'язків (на поверхневий атом) розірваних при розколі, N_s – поверхнева густина атомів. Підставивши типові значення ($E = 3eB$, $Z_s / Z = 0,25$, $N_s = 10^{15} ат / см^2$), отримаємо γ ; $1200 ерг / см^2$.

3. Анізотропія поверхневого натягу. Поверхневий натяг поверхні нанокристала істотно залежить від орієнтації зразка. Для цього розглянемо

© Бичко М.В., Гаврилова В.С., Сухомлин В.П., Шурдук А.І., 2013

двохмірне тверде тіло, нормаль до границі якого ненабагато відхиляється від напрямку [01]. У результаті отримаємо віцинальну поверхню, яка складається з великої кількості моноатомних сходинок, які розділені терасами, шириною *na*, де *a* – стала кристалічної решітки.

Якщо число n велике, тоді кут між напрямками [01] і дорівнює $\theta = 1/n$. Поверхневий натяг вздовж напрямку [1n], який позначено $\gamma(\theta)$, містить внесок поверхневого натягу вздовж площини (01), рівний $\gamma(0)$, і внески кожної окремої сходинки. Якщо через β позначити енергію, що припадає на одну сходинку, тоді повний поверхневий натяг поверхні (1n) дорівнює $\gamma(\theta) = \gamma(0) + \left(\frac{\beta}{a}\right)|\theta|$.

Зміна знаку другого доданку вказує на те, що для створення сходинки завжди потрібна затрата енергії. З виразу слідує, що функція $\gamma(\theta)$ неперервна і поблизу точки $\theta = 0$, але її похідна має розрив у цій точці, тобто існує точка повернення. Більш того $\Delta\left(\frac{d\gamma}{d\theta}\right)_{\theta=0} = 2\beta / a$.

Розглянемо випадок великих кутів θ. Густина сходинок буде зростати і при розрахунку поверхневого натягу потрібно враховувати енергію взаємодії між сходинками. У цьому випадку функція $\gamma(\theta)$ має точку повернення при кожному значенні кута, що відповідає раціональному індексу Міллера. Зміна похідної функції $\gamma(\theta)$ у точці, що розглядається, швидко зменшується зі збільшенням індекса [2]:

$$\Delta\left(\frac{d\gamma}{d\theta}\right) : \frac{1}{n^4}.$$

Анізотропія поверхневого натягу визначає рівноважну форму нанокристалів, так як нанокристал намагається прийняти таку форму, при якій для фіксованого об’єму величина мінімальна:

$$\oint \gamma(\theta) dA.$$

Література

1. Гаврилова В. Дефекти у нанокристалах / В. Гаврилова, В. Сухомлин // Збірник наукових праць викладачів, аспірантів, магістрантів та студентів фізико-математичного факультету. – Полтава: ТОВ «АСМІ», 2012. – С.130-132.
2. Ландау Л.Д. Сборник трудов / Л.Д. Ландау. – М.: Наука, 1969. – 244 с.

Наші автори

АНТОНЕЦЬ Марина Володимирівна – студентка IV курсу

АРЕНДАРЕНКО Наталія Валентинівна – студентка V курсу

БАБЧУК Юлія Вікторівна – студентка V курсу

БАЗИЛЕВИЧ Тетяна Володимирівна – магістрантка

БАРАНЕНКО Тетяна Іванівна – студентка V курсу

БАРБОЛІНА Тетяна Миколаївна – кандидат фізико-математичних наук, завідувач кафедри математичного аналізу та інформатики

БЕЗВЕРХНІЙ Олег Віленович – старший викладач кафедри математичного аналізу та інформатики

БЕЗРУК Ольга Олександрівна – студентка V курсу

БИЧКО Марина Вікторівна – викладач кафедри медичної інформатики і медичної та біологічної фізики ВДНЗУ „УМСА”

БИЧОВА Анна Іванівна – магістрантка

БІДЕНКО-СВІТЕЦЬКА Єлизавета Андріївна – студентка IV курсу

БІЛАН Вікторія Олександрівна – студентка V курсу

БОДНЯ Тетяна Василівна – студентка V курсу

БОЙКО Юлія Анатоліївна – студентка III курсу факультету філології та журналістики

БОЙКО Юлія Валеріївна– студентка IV курсу

БОЛЬШАЯ Оксана Вікторівна – асистент кафедри політекономії

БОНДАРЕНКО Іван Іванович – студент V курсу

БОНДАРЕНКО Тетяна Сергіївна – студентка III курсу факультету філології та журналістики

БОНДАРЕНКО Юлія В’ячеславівна – студентка IV курсу факультету філології та журналістики

БОРИС Катерина Андріївна – студентка V курсу

БОРИСЕНКО Віталія Віталіївна – студентка V курсу

БУЦЬКА Марина Олександрівна – студентка V курсу

ВАЦ Олена Сергіївна – студентка III курсу факультету філології та журналістики

ВАЩЕНКО Наталія Сергіївна – студентка V курсу

Севрюк І.В., Кричильська А.М. Системно-структурний підхід до проблеми формування логічного мислення в учнів 5-6 класів 129

Сторожук А.Ю. До питання формування у старшокласників дослідницьких умінь і навичок 132

Черкаська Л.П., Бодня Т.В. Методика використання інтерактивних технологій під час навчання учнів математики 134

Шевченко Н.С. До проблеми формування та розвитку математичних дослідницьких умінь учнів у класах математичного профілю 137

Шкіль О.В. Деякі аспекти організації самостійної роботи учнів 139

Яковенко А.О. Використання прикладних задач під час навчання алгебри учнів основної школи 141

ІІІ. ФІЗИЧНІ НАУКИ 143

Руденко О.П. До ювілею університету 143

Іванко В.В., Дідора Т.Д., Базилевич Т.В. Фазовий перехід метал-діелектрик у вузькозонних матеріалах 147

Бичко М.В., Гаврилова В.С., Сухомлин В.П., Шурдук А.І. Анізотропія фізичних властивостей у нанокристалах 149

Єлізаров О.І., Журав В.В., Єлізаров М.О. Особливості розсіювання і поглинання світла синьозеленими водоростями в процесі їх деградації 151

Хорольський О.В., Руденко О.П., Саєнко О.В. Акустичні та в'язкопружні властивості апротонних органічних розчинників 154

Стеценко С.А., Руденко О.П., Хлопов А.М. Властивості толуолу, метоксибензолу та їх фторпохідних 157

Прокопенко В.В. Визначення горизонтальних координат світила для оптимізації проведення спостережень 160

Приходько О.В. Взаємозалежність гідратаційної здатності креатину та структурних характеристик його молекул 163

Гетало А.М., Солтанова Ю.В., Прокопенко В.В. Еволюція поглядів на міжмолекулярні взаємодії 165

Солод Н.М., Сухомлин В.П., Шурдук А.І. Квазікристали 168

Приходько О.В., Лапека І.В. Опис специфічної гідратації високоактивних нутрієнтів методом наближення супермолекули 171

Саєнко Р.О., Рокитна Н.В. Термодинамічні характеристики в'язкої 173