ВІСНИК
КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ISSN 1728-2411

ФІЗИКА 1/2(16/17)/2014

Засновано 1958 року

Публікуються результати експериментальних і теоретичних досліджень у галузях фізики металів, оптики, молекулярної фізики та теплофізики, ядерної фізики.
Для науковців, викладачів вищої школи, аспірантів та студентів.

Публикуются результаты экспериментальных и теоретических исследований в области физики металлов, оптики, молекулярнй физики и теплофизики, ядерной физики.
Для ученных, преподавателей высшей школы, аспирантов и студентов.

In this edition are published results of experimental and theoretical investigations in fields of physics of metals, optics, molecular physics and thermophysics, nuclear physics.
For scientific researchers, teachers, postgraduates, and students.

ВІДПОВІДАЛЬНИЙ РЕДАКТОР	М. В. Макарець, д-р фіз.-мат. наук, проф.
РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ	Л. В. Поперенко, д-р фіз.-мат. наук, проф. (заст. відп. ред.); Г. В. Весна, канд. фіз.-мат. наук, наук. співроб. (відп. секр.); В. А. Макара, чл.-кор. НАН України, д-р фіз.-мат. наук, проф.; С. М. Єжов, д-р фіз.-мат. наук, проф.; С. Й. Вільчинський, д-р фіз.-мат. наук, проф.; І. М. Каденко, д-р фіз.-мат. наук, проф.; М. П. Куліш, д-р фіз.-мат. наук, проф.; В. М. Ящук, д-р фіз.-мат. наук, проф.; Д. А. Гаврюшенко, д-р фіз.-мат. наук, проф.

Адреса редколегії	03127, Київ-127, вул. Глушкова, 2, корп. 1, фізичний факультет ☎ (38044) 565 26 86 76
Затверджено	Вченою радою фізичного факультету 07.09.08 (протокол № 1)
Атестовано	Вищою атестаційною комісією України. Постанова Президії ВАК України № 1-05/6 від 09.06.1999
Зареєстровано	Міністерством інформації України. Свідоцтцво про державну реєстрацію КВ № 16291-476 ЗР від 17.12.09
Засновник та видавець	Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет". Свідоцтво внесено до Державного реєстру ДК № 1103 від 31.10.02
Адреса видавця	01601, Київ-601, б-р Т. Шевченка, 14, кімн. 43 ☎ (38044) 239 31 72, 239 32 22; факс 239 31 28

© Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
ВПЦ "Київський університет", 2014

ЗМІСТ

ВИПУСК 1(16)

Атамась А., Меклеш В.
Вплив надкритичних умов на локальну структуру нескінченно розведеного водного розчину NaBr 5

Дегода В., Весна В., Подуст Г.
Темнова провідність високоомних напівпровідників 8

Сенчуров С.
Аналіз ефективності цифрової рентгенівської лінійної томографі 35

ВИПУСК 2(17)

Гаращенко В., Зеленський С., Копишинський О.
Оптичне обмеження у суспензіях вуглецевих мікрочастинок та сумішей на їх основі 37

Попов О., Бойко В., Ліщук П., Мельник В., Мельниченко М., Прокопов О., Федорець В., Ярмощук Є.
Особливості формування тугоплавких фаз в процесі реакційного пресування
порошкової суміш Al_2O_3-SiO_2-C-Al 40

Супрун А., Шмельова Л.
Центрально симетричні солітони для електронних збуджень твердих тіл 43

Шірінян А., Макара В.
Концепція створення і розвитку наноіндустрії в Україні 50

СОДЕРЖАНИЕ

ВЫПУСК 1(16)

Атамась А., Меклеш В.
Вплияние сверхкритических условий на локальную структуру
безконечно разведеного водного раствора NaBr 5

Дегода В., Весна В., Подуст Г.
Темновая проводимость высокоомных полупроводников 8

Сенчуров С.
Анализ эффективности цифровой рентгеновской линеной томографии 35

ВИПУСК 2(17)

Гаращенко В., Зеленский С., Копишинский О.
Оптическое ограичение в суспензиях углеродных микрочастиц и смесей на их основе 37

Попов О., Бойко В., Ліщук П., Мельник В., Мельниченко М., Прокопов О., Федорець В., Ярмощук Є.
Особенности формирования тугоплавких фаз в процесе реакционного
прессованния порошковой смеси Al_2O_3-SiO_2-C-Al 40

Супрун А., Шмелева Л.
Центрально симетричные солитоны для електронных возбуждений твердих тел 43

Ширинян А., Макара В.
Концепция создания и развития наноиндустрии в Украине 50

CONTENTS

ISSUE 1(16)

Atamas A., Meklesh V.
Influence supercritical conditions on the local structure infinitely dilute aqueous solutions of NaBr 5

Degoda V., Vesna V., Podust G.
The dark conductivity of high-resistance semiconductors 8

Senchurov S.
The analysis of the efficiency of the digital x-ray linear tomography 35

ISSUE 2(17)

Herashchenko V., Zelenskij S., Kopyshynskij O.
The optical limiting properties of epoxy resin suspensions of carbon microparticles 37

Popov O., Boiko V., Lishchuk P., Melnik V., Melnichenko M., Prokopov O., Fedorec V., Yarmoshchuk E.
Formation features of refractory phases during the reactionary compaction of powder mixtures of Al_2O_3-SiO_2-C-Al.....40

Suprun A., Shmeleva L.
The centrally symmetric solitons for electronic excitations of solids.....43

Shirinian A., Makara V.
Conception of creation and development of nano-industry in Ukraine 50

УДК 539.1; 539.6; 53.096

Н. Атамась, д-р фіз.-мат. наук, пров. наук. співроб.,
В. Меклеш, студ.
КНУ імені Тараса Шевченка, Київ

ВПЛИВ НАДКРИТИЧНИХ УМОВ НА ЛОКАЛЬНУ СТРУКТУРУ НЕСКІНЧЕННО РОЗВЕДЕНОГО ВОДНОГО РОЗЧИНУ NaBr

Методом молекулярної динаміки досліджений вплив однозарядного натрієвого електроліту на локальну структуру нескінченно розведеного водного розчину NaBr і рухливість його компонент за температур T = 683 K та T = 300 K. Отримані дані дали можливість визначити механізм вливу характеристик іонів та катіонів, температури на формування локальної структури нескінченно розведених водних розчинів елетролітів.

Ключові слова: надкритичний стан, локальна структура, водневі зв'язки, енергетичні та динамічні властивості, радіальні функції розподілу.

Вступ

Для повного розуміння властивостей і можливостей використання надкритичної води (НКВ) як розчинника (реагенту, каталізатора) необхідна інформація про її мікроструктуру і про особливості процесів, що відбуваються на молекулярному рівні. Відомо, що поблизу критичної точки і кривої насичення фізико-хімічні властивості НКВ дуже чутливі до зміни параметрів стану. Зі зростанням температури і тиску відбувається різке зменшення діелектричної проникливості, збільшується розчинність неполярних речовин і знижується розчинність електролітів.

Надкритична вода веде себе подібно органічній рідині з високою розчинювальною здатністю. При цьому навіть невелика зміна температури може призвести до повного розчинення або осадження із розчину оксидів і солей. Ця властивість породила великий інтерес до вивчення НКВ, оскільки відкриває широкі перспективи для застосування НКВ в якості екологічно безпечного середовища при окислювальному руйнуванні небезпечних забруднень в хімічній промисловості. Більш того, НКВ може бути використана для трансформації органічних забруднень в легку органічну сировину [1, 10]. Відповідно до теорії, розробленої в [4], збільшення аномальної розчинювальної здатності виникає через те, що критична температура бінарної суміші (вода-органічна речовина) може бути трохи нижче критичної температури чистої води. Завдяки невеликій різниці між цими двома температурами і проявляються незвичайні властивості НКВ як розчинника.

Поблизу критичної точки в структурі води відбуваються значні зміни: розгалужена просторова сітка водневих зв'язків (ВЗ) руйнується і перетворюється на окремі ланцюжкові структури – кластери, що складаються з (2÷4) частинок [9, 6]. Число молекул в таких кластерах зростає із збільшенням щільності. При високій щільності води (T = 680 ... 771 K; ρ = 0,972 ... 1,284 г/см^3) одночасно поряд з загальною нескінченною структурою, продовжують існувати ізольовані кластери. Ситуація значно ускладнюється при введенні у НКВ електроліту. Найбільш чітко уявити та проаналізувати описані вище явища дозволяють дослідження нескінченно розведених розчинів, в яких відсутні взаємодії між молекулами розчиненої речовини.

Проведене нами дослідження ВЗ в надкритичної воді і її взаємодії з електролітом дає інформацію про структурні перетворення, що призводять до зміни локальної структури нескінченно розведених водних розчинів електролітів. Зважаючи на те, що досліджувана система знаходиться у надкритичному стані доцільно прослідкувати вплив розчиненої солі електроліту NaBr на процеси формування локальної структури нескінченно розведеного водного розчину у надкритичному стані.

Деталі комп'ютерного експерименту. При проведенні комп'ютерного експерименту з досліджень особливостей впливу розчиненої речовини на характеристики водних систем у надкритичному стані використовувався метод молекулярної динаміки, який було реалізовано за допомогою модифікованого програмного пакету DL_POLY з часовим кроком 2фс. Далекодіюча електростатична взаємодія враховувалася використанням Евальдового підсумовування. Для визначення енергетичних характеристик проводилося кілька серій незалежних розрахунків з кроком 200фс, 160фс й 80фс. Всі радіальні функції розподілу були отримані з кроком розрахунків 200фс. Геометричні параметри та значення потенціалів для води, іонів та катіонів у надкритичному стані були взяті з роботи [11]. При проведенні розрахунків катіони, аніони та атоми молекул розчинника представлялись як тверді, заряджені модельні частинки з фіксованою геометрією. Усі дослідження проводились для систем, які складались з 255 молекул води та однієї дисоційованої молекули розчиненої речовини NaBr при T = 300 K та за надкритичних умов (ρ = 0,35г/см^3, T = 683 K).

Модельні уявлення для опису властивостей нескінченно розведених водних розчинів NaBr у надкритичному стані. Застосування методу молекулярної динаміки для дослідження рідин дозволяє визначити як мікроскопічні, так і макроскопічні властивості досліджуваних систем, зокрема, дає можливість одержати інформацію про структурні, термодинамічні та енергетичні властивості водних розчинів за різних температур.

При проведенні досліджень було обрано молекулярну модель рідини та парні потенціали, які використовують у комп'ютерному моделюванні, що є ефективними, оскільки представляють всі ефекти, пов'язані із взаємодією між багатьма частинками. Прикладом ефективного потенціалу (1) є потенціал для рідких систем, який є сумою Леннард-Джонсівської та кулонівської складових:

$$U = U_{L-J} + U_{Coul} = \sum_{ij} 4\varepsilon_{ij}\left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{6}\right] + \sum_{ij}\frac{q_i q_j}{r_{ij}}, \qquad (1)$$

де параметри ε_{ij}, σ_{ij} та q_i одержуються на основі модельних уявлень та з аналізу експериментальних даних. Параметри потенціалу ε_{ij}, та σ_{ij} (1) для взаємодії між атомами молекул розчинника із атомами молекул розчиненої речовини розраховуються з використанням комбінаційного правила Лоренца-Бертло (2) [3] :

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}, \quad \varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j} \qquad (2)$$

Значення параметрів σ і ε для води, іонів і катіонів представленні в таб. 1.

© Атамась Н., Меклеш В., 2014

Таблиця 1

Заряди *q* та параметри (Леннард-Джонсівський параметр σ, ε та молекулярна маса M для атомів молекул води, NaBr [2])

Атом	*q*, e	*σ*, Å	*ε*, ккал/моль	*M*, г/моль
H	+0,41	1,0	0,15488	1
O	–0,82	3,166	0,65020	15,990
Br^-	–1	4,626	0.090301	79,904
Na^+	+1	2,876	0,027280	22,9897

Слід зазначити, одне з чільних місць у дослідженнях з використанням чисельних методів займають розрахунки і аналіз радіальних функцій розподілу (РФР), що характеризують ймовірності розташування атомів [7] у системі, та дозволяють визначити густину ймовірності знаходження атомів сорту "*y*" навколо атомів сорту "*x*" та є функцією відстані. У виразі (3) чисельник дорівнює середньому числу атомів сорту "*y*" в сферичному шарі з радіусом між *R* та *(R+dR)*, а знаменник нормує розподіл так, що $g_{xy} = 1$ при N_y і дорівнює чисельній густині $\rho_y = N/V$.

$$g_{xy} = \frac{\langle N_y(R, R+dR)\rangle}{\rho_y 4\pi R^2 dR} \qquad (3)$$

Експериментальним шляхом РФР одержують з даних по рентгенівській спектроскопії, та спектроскопії розсіювання нейтронів. Інтегрування РФР у межах першого максимуму дозволяє точно визначити кількість найближчих сусідів. Необхідно зазначити, що положення першого максимуму РФР ототожнюється з довжиною міжатомного зв'язку, а положення першого та другого мінімумів функції РФР ототожнюється з розмірами першої і другої гідратаційних сфер. Перша гідратаційна сфера визначається як простір, обмежений сферою з радіусом, який чисельно дорівнює положенню першого мінімуму РФР. Друга гідратаційна сфера визначається як простір сферичного шару між першим і другим мінімумами РФР. Аналіз сітки водневих зв'язків між молекулами води проводився з використанням наступного критерію водневого зв'язку: утворення водневого зв'язку можливе на відстані між найближчими сусідніми атомами кисню молекул води не більшій за 3,5 Å. За водневий зв'язок між найближчими сусідами обирався такий, який має мінімальну відстань між атомами O та H з усіх можливих міжмолекулярних відстаней. Кут водневого зв'язку визначався як кут між O-H вектором зв'язку однієї молекули води і O-H вектором водневого зв'язку іншої молекули води, що приймає значення від 130^0 до 180^0 [5].

Результати експерименту та їх обговорення. Дослідження впливу температури, тиску та фізичних властивостей однозарядних натрієвих електролітів у досліджуваних водних системах доцільно почати з аналізу впливу надкритичних умов на взаємодію між молекулами води [8]. При цьому слід зазначити, що вплив температури та тиску на параметри атомів молекули та геометрії молекули води враховувався використанням значень зарядів, параметрів ε_{ii}, σ_{ii}, які спеціально розроблені для опису атомів молекул води у надкритичному стані і представлені у роботі [9].

На рис. (1–3) представлено одержані в результаті комп'ютерного експерименту РФР, які характеризують взаємодію між молекулами води у нескінченно розведеному водному розчині NaBr при *T* = 300 К та у надкритичному стані при *T* = 683 К та ρ = 0,35 г/см^3 (рис. 1).

Порівняння одержаних даних, а саме, РФР для ймовірностей знаходження атомів кисню молекул води O^w як за нормальних умов так і надкритичному стані свідчить, що відстань між взаємодіючими молекулами води, що ототожнюється з положенням першого максимуму РФР для O^w… O^w становить 2,8 Å. Слід зазначити, що за нормальних умов ця відстань складає 2,7 Å. Тобто різниця між одержаними значеннями відстаней O^w… O^w у надкритичному стані та за нормальних умов знаходиться у межах похибки визначення відстаней. Тобто, можна вважати, що перехід води у надкритичний стан за умови врахування параметрів атомів і значень потенціалів для атомів молекули води не призводить до зміни відстані між взаємодіючими молекулами.

В свою чергу, аналіз РФР, які характеризують взаємодію O^w…H^w та асоціюються з довжиною водневих зв'язків у системі, показує, що збільшення температури і тиску не впливає за зміну положення першого максимуму у межах першої гідратаційної оболонки. Аналіз РФР (рис. 1) дозволяє стверджувати, що локальна структура води у надкритичному стані стає більш впорядкованою в межах першої та другої гідратаційних оболонок, на що вказує збільшення значень РФР для першого мінімуму як для взаємодії O^w… H^w так і для взаємодії O^w… O^w .

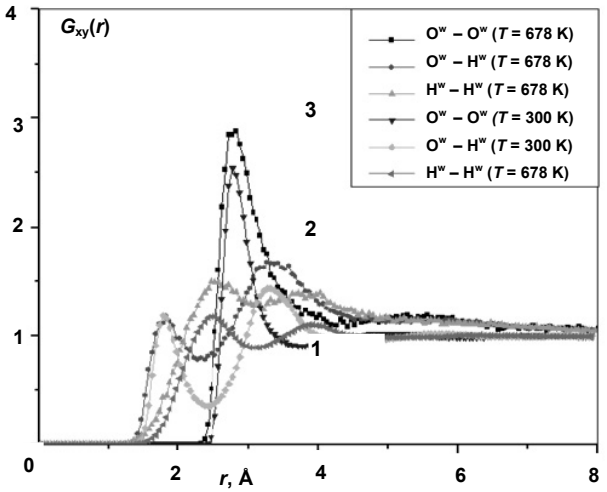

Рис. 1. РФР для ймовірності знаходження атомів молекул води у нескінченно розведеному водному розчині NaBr при *T* = 683 К та *T* = 300 К

На рис. 2 представлені РФР, які описують взаємодію між атомами молекули води та катіону Na^+ за нормальних умов та у надкритичному стані.

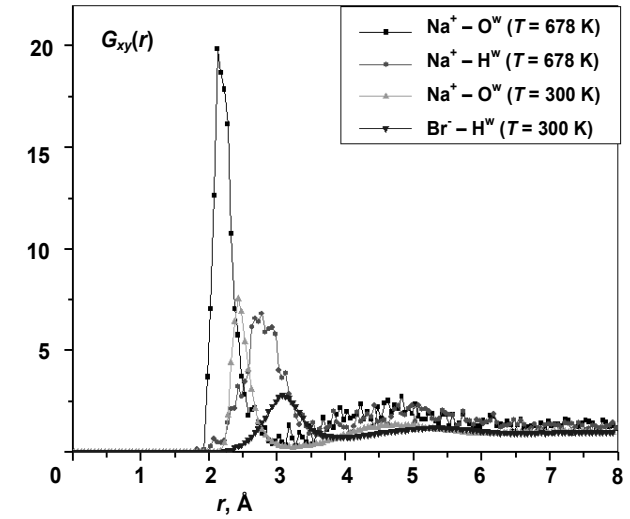

Рис. 2. РФР для ймовірності знаходження атомів молекул води, катіону Na^+ у нескінченно розведеному водному розчині NaBr при *T* = 300К та *T* = 683 К

Аналіз значень РФР для взаємодій $Na^+...O^w$ та $Na^+...H^w$ показує, що при переході до надкритичного стану збільшуються значення $G_{XY}(R)$. Слід зазначити, що положення першого максимуму $Na^+...O^w$ зменшується до 2.2 Å, що значно менше відповідних значень за T=300K. В свою чергу, значення $G_{XY}(R)$ для положення першого мінімуму у випадку взаємодії $Na^+...O^w$ не змінюється, що свідчить про ущільнення локальної структури рідини в околі Na^+. У випадку взаємодії $Na^+...H^w$ при переході до надкритичних умов спостерігається зменшення відстані між взаємодіючими частинками до 2.8 Å, що як і випадку попередньо розглянутої взаємодії, свідчить про збільшення локальної густини досліджуваної системи та ущільнення локальної структури розчину за надкритичних умов. Зазначимо, що згідно критерію водневого зв'язку, у нескінченно розведеному водному розчині NaBr за надкритичних умов за рахунок кулонівської взаємодії можуть утворюватись комплекси $Na^+...O^w...H^w$ та $Na^+...H^w...O^w$.

В випадку взаємодії іону Br^- (рис. 3) з молекулами води перехід до надкритичного стану призводить також до збільшення значень положення першого максимуму для взаємодій $Br^-...O^w$ (3,4 Å) та $Br^-...H^w$ (2,4 Å). За надкритичних умов спостерігається збільшення відстані між іоном Br^- та атомом водню молекули води, відстань між якими при нормальних умовах складала 2,0 Å. У надкритичному стані утворюються стійкі комплекси $Br^-...H^w$ з довжиною 2,4 Å, що свідчить про зменшення ролі цього класу кулонівських взаємодій при переході до надкритичного стану, що повинно знайти своє відображення у зміні енергетичних та динамічних властивостей досліджуваних систем при переході до надкритичного стану.

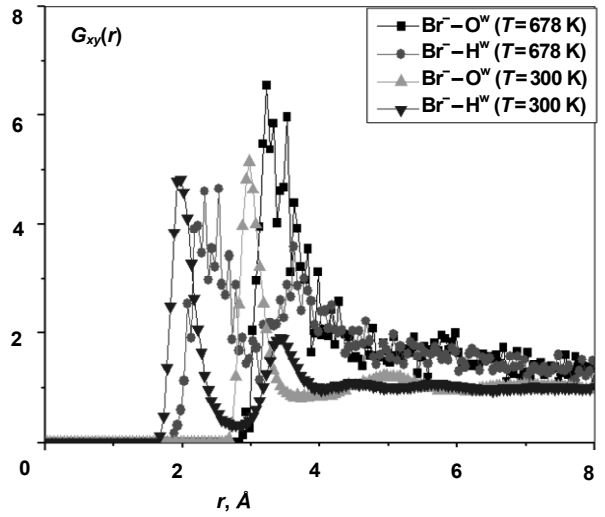

Рис. 3. РФР для ймовірності знаходження атомів молекул води, іонів Br^- у нескінченно розведеному водному розчині NaBr при T = 300 К та T = 683 К

В результаті проведеного комп'ютерного експерименту були одержані і проаналізовані енергетичні та динамічні властивості досліджуваних рідинних систем. Значення середньої загальної енергії міжмолекулярної взаємодії, її Ван-дер-Ваальсовської та кулонівської складових надано у таблиці 2.

Аналіз даних таблиці 2 показує, що при переході до надкритичних умов значення $<E_{сум}>$ у досліджуваній системі збільшується за рахунок збільшення значень $<E_{Кулон}>$. Значення $<E_{ВдВ}>$ зменшуються із збільшенням значень температури досліджуваної системи.

Таблиця 2

Значення середньої енергії міжмолекулярної взаємодії ($<E_{сум}>$), Ван-дер-Ваальсовської ($<E_{ВдВ}>$) та кулонівської ($<E_{Кулон}>$) складових (ккал/моль) для нескінченно розведеного водного розчину NaBr за різних температур

Температура	$<E_{сум}>$	$<E_{ВдВ}>$	$<E_{Кулон}>$
300К	–1062	118	–1180
683К	–750	79	–829

Як зазначалось вище, аналіз РФР для взаємодій $Na^+...O^w$ та $Na^+...H^w$ показав існування ущільнення локальної структури розчину в околі Na^+ при переході до надкритичних умов, що свідчить про зростання ролі короткодіючих взаємодій і повинно в свою чергу знайти своє відображення у рухливості водно-катіонних комплексів. У випадку взаємодій $Br^-...O^w$ та $Br^-...H^w$ перехід до надкритичного стану призводить до збільшення розмірів першої та другої гідратаційних оболонок, що дає можливість стверджувати про зростання ролі далекодіючих кулонівських взаємодій.

Інформація про зміну динамічних властивостей досліджуваних систем одержувалась із аналізу розрахованих значень коефіцієнта дифузії (табл. 3), який визначається шляхом інтегрування часової автокореляційної функції:

$$D = \frac{1}{3}\int_0^\infty \langle V(t)V(0)\rangle dt$$

Аналіз даних, які представлені в таблиці 3 показує, що збільшення температури до T = 683 К призводить до збільшення рухливості молекул води, катіонів Na^+ та іонів Br^-. При T = 300 К одержані значення коефіцієнта самодифузії молекул води мають один і той же порядок із значеннями коефіцієнта самодифузії катіону. Тобто, за нормальних умов катіонно-водний комплекс, розмір якого трохи перевищує відстань між молекулами води, рухається у воді майже не розриваючи водневі зв'язки між молекулами води. За надкритичних умов, згідно одержаних даних, спостерігається ущільнення локальної структури рідини в околі катіонів Na^+, яке не призводить до суттєвої зміни характеру руху катіонно-водного комплексу.

Інша ситуація спостерігається у випадку руху комплексів, що утворені з рахунок взаємодії іонів з водою. Відмітимо, що при нормальних умовах значення коефіцієнта самодифузії іонів Br^- майже в три рази перевищують значення коефіцієнта самодифузії катіону та води. За цих умов воднево-пов'язаний комплекс вода-іон має менший розмір ніж відстань між сусідніми молекулами води, що і пояснює відносно високе значення коефіцієнта самодифузії іонів Br^-. У випадку надкритичних умов спостерігається протилежна ситуація, а саме, значення коефіцієнта самодифузії іонів Br^- в два рази менше значення коефіцієнта самодифузії катіону та води. Одержаний результат свідчить про те, що воднево-пов'язаний комплекс іон–вода за надкритичних умов рухається повільніше ніж молекули води, що пов'язано насамперед з збільшенням його розмірів, які при цьому перевищують відстань між сусідніми молекулами води, внаслідок чого його рух пов'язаний з суттєвою перебудовою сітки водневих зв'язків у рідині.

Таблиця 3

Значення коефіцієнта самодифузії D (10^{-9} м^2/с) іонів, катіонів та молекул води за різних температур

Речовина	T = 300 К	T = 683 К
Na^+	11,2	39,1
Br^-	39,3	20,5
H_2O	10,6	42,9

Висновки. В результаті проведеного аналізу даних відносно локальної структури та динамічної поведінки встановлено: у досліджуваній системі за надкритичних умов спостерігається ущільнення локальної структури нескінченно розведеного водного розчину NaBr в межах першої гідратаційної оболонки відносно значень, що одержані для цих параметрів за нормальних умов; збільшення температури до T = 683 К призводить до збільшення рухливості не тільки молекул води, а і катіонів Na^+, іонів Br^-.

Також одержано, що у випадку взаємодій $Na^+ \ldots O^w$ та $Na^+ \ldots H^w$ перехід до надкритичних умов призводить до збільшення ролі короткодіючих взаємодій, внаслідок чого спостерігається ущільнення локальної структури в околі катіону Na^+.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Галкин, А. А.* Вода в суб- и сверхкритическом состояниях – универсальная среда для осуществления химических реакций / А. А. Галкин, В. В. Лунин // Успехи химии. – 2005. – Т. 74, № 1. – С. 24–40.
2. *Крокстон К.* Физика жидкого состояния. Статистическое введение / К. Крокстон. – М. : Мир, 1978. – 400 с.
3. *Allen M. P.* Computer Simulation of Liquids / M.P. Allen, D.Y. Tildesley. – Oxford: Clarenton Press. – 2001. – 620 p.
4. *Biswas, R.* Anomalous Solubility of Organic Solutes in Supercritical Water: A Molecular Explanation / R. Biswas, B. Bagchi // Proc. Indian Acad. Chem. Sc. − 1999. − Vol. 111. − P. 387–394.
5. *Chau P. L.* Computer Simulation of the Structural Effect of Pressure on the Hydrophobic Hydration of Methane / P. L. Chau, R. L. Mancera // Mol. Phys. – 1999. – Vol. 96, № 1. – P. 109–122.
6. *Guillot B. A.* Reappraisal of what We Have Learnt During three Decades of Computer Simulations on Water / B. Guillot // J. Mol. Liq. – 2002. – Vol. 101, No. 1–3. – P. 219–260.
7. *Jorgensen W.* Optimized Intermolecular Potential Functions for Liquid Alcohols / W. Jorgensen // J. Phys. Chem. – 1986. – Vol. 90. – P. 1276–1284.
8. *Kalinichev A. G.* Hydrogen Bonding in Supercritical Water; a Monte Carlo Study / A. G. Kalinichev, J. D. Bass // Chem. Phys. Lett. – 1994. – Vol. 231. – P. 301–307.
9. *Kalinichev, A. G.* Molecular Simulations of Liquid and Supercritical Water: Thermodynamics, Structure, and Hydrogen Bonding / A. G. Kalinichev // Rev. Mineralogy and Geochem. – 2001. – Vol. 42. – P. 83–129.
10. *McHugh M. A.* Supercritical Fluid Extraction: Principles and Practice / M. A. McHugh, V. J. Krukonis. – Amsterdam : Butterworth-Heinemann, 1994. – 282 p.
11. Naworyta J. P. Dynamics Of Aqueoes Solutions of Ions and Neutral Solutes at Infinite Dilution at a Supercritical Water / J. P. Naworyta, S.Koneshan, J.C.Rasaiah // J.Am.Chem.Soc. –200. – Vol.122. – P. 11194–11202.

Надійшла до редколегії: 27.05.14

Н. Атамась, д-р физ.-мат. наук, ведущ. науч. сотр.,
В. Меклеш, студ.
КНУ имени Тараса Шевченко, Киев

ВЛИЯНИЕ СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ НА ЛОКАЛЬНУЮ СТРУКТУРУ БЕЗКОНЕЧНО РАЗВЕДЕННОГО ВОДНОГО РАСТВОРА NaBr

Методом молекулярной динамики исследовано влияние однозарядного натриевого електролита на локальную структуру безконечно разведенного водного раствора NaBr и подвижнось его компонент при температурах T = 683 K и T = 300 K. Полученные данные дали возможность определить механизм влияния характеристик ионов и катионов, температуры на формирование локальной структуры безконечно разведенных водных растворов элетролитов.

Ключевые слова: сверхкритическое состояние, локальная структура, водородные связи, энергетические и динамические свойства, радиальные функции распределения.

A. Atamas, Dr. Sci. (Phys.-math), leading scientist,
V. Meklesh, stud.
National Taras Shevchenko University of Kiev

INFLUENCE SUPERCRITICAL CONDITIONS ON THE LOCAL STRUCTURE INFINITELY DILUTE AQUEOUS SOLUTIONS OF NaBr

The method of molecular dynamics studied the impact of singly charged sodium salt electrolyte on the local structure infinitely dilute aqueous solution of NaBr and mobility of its components at temperatures T = 683 K and T = 300 K. These data made it possible to determine the mechanism of impact characteristics of ions and cations, temperature on the formation of local structure infinitely dilute aqueous solutions electrolytes.

Key words: supercritical state, local structure, hydrogen bond, energy and dinamic propertys, radil function distribution.

УДК 535.3; 535.37

В. Дегода, д-р фіз.-мат. наук, пров. наук. співроб.,
В. Весна, д-р фіз.-мат. наук, старш. наук. співроб.,
Г. Подуст, асп.
КНУ імені Тараса Шевченка, Київ

ТЕМНОВА ПРОВІДНІСТЬ ВИСОКООМНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ

В роботі одержана система розрахунків просторових розподілів вільних і локалізованих електронів, величини і напрямку приконтактного електричного поля і потенціалу для високоомних напівпровідників n-типу з контактною різницею потенціалів –0,1 В < U_C < 0,1 В. Система розрахунку базується на розв'язку системи кінетичних рівнянь, а не на розв'язку одного диференційного рівняння для потенціалу. Для розрахунків використано найпростішу модель напівпровідника у якому є тільки один тип глибоких пасток з концентрацією ν_i, які частково заповнені локалізованими електронами з мілких донорів. Індекс "i" означає, що потім можна буде ввести в розрахунки інші мілкі незаповнені центри та більш глибокі заповнені пастки чи центри; напівпровідник перерізом S і довжиною d ~ 1 см має на кінцях електричні контакти. Вісь OX направлена вздовж зразка і перпендикулярна до контактів. Розглянуто випадки, коли концентрації

© Дегода В., Весна В., Подуст Г., 2014

електронів у металі на рівні зони провідності напівпровідника N_M відрізняється від концентрації вільних електронів у напівпровіднику N_0: $N_M > N_0$, $N_M < N_0$ та випадок, коли ці концентрації рівні ($N_M = N_0$). Встановлено, що неспівпадіння концентрацій N_M і N_0 призводить до появи значного приконтактного електричного поля (сотні В/см), яке експоненційно зменшується в напівпровіднику з відстанню від контакту.

Встановлено, що зовнішнє електричне поле змінює величину приконтактного поля, причому у випадку його паралельності до приконтактного поля буде відбуватися зменшення U_C, а для протилежного напрямку поля – збільшення U_C. При наявності двох однакових електричних контактів ці зміни в приконтактних областях будуть частково компенсуватись для випадку малих полів. В результаті, початкова ділянка ВАХ буде лінійною При великих зовнішніх полях для $U_C > 0$ ВАХ високоомного напівпровідника буде несуттєво відрізнятися від лінійної залежності. А для $U_C < 0$ ВАХ стає сублінійною. Тобто, для високоомних напівпровідників з омічними контактами виконується закон Ома.

Ключові слова: темнова провідність, високоомний напівпровідник, глибокі пастки, приконтактне поле.

Вступ. Для досліджень електричних характеристик напівпровідника необхідно мати омічні контакти метал–напівпровідник [1, 2] для підключення його до зовнішнього електричного кола. В загальному випадку омічним контактом називається такий контакт метал–напівпровідник, який не створює потенціального бар'єру на границі і характеризується лінійною і симетричною вольт-амперною характеристикою (ВАХ), а величина провідності повинна бути обернено пропорційною до відстані між контактами. Для того, щоб контакти не впливали на вимірювання ВАХ напівпровідника, падіння напруги на них повинно бути на декілька порядків меншим за прикладену напругу до зразка. Точно підібрати пару метал-напівпровідник з однаковими роботами виходу практично неможливо, а тому на практиці застосовують деякі прийоми для отримання контактів з малим бар'єром [1, 2]. Омічні контакти можна одержати при використанні металів з роботою виходу меншою, ніж в напівпровіднику *n*-типу, і більшою ніж в напівпровіднику *p*-типу. Для багатьох напівпровідників вже відомі метали або сплави для одержання омічних контактів [2]. Широке практичне застосування омічних контактів для порівняно низькоомних напівпровідників ще не свідчить про незначний вплив контактів на експериментальні результати досліджень ВАХ у високоомних зразках.

Для прикладу будемо розглядати тільки напівпровідник *n*-типу (для напівпровідника *p*-типу ситуація буде повністю симетрична). Наявність омічних контактів для експериментальних досліджень означає, що необхідно підібрати такий метал для контакту, у якому концентрація електронів на рівні дна зони провідності напівпровідника (N_M) точно дорівнює концентрації вільних електронів у напівпровіднику (N_0). Але підібрати такий метал чи сплав практично неможливо, а крім того ще необхідна достатня адгезія цього металу на напівпровіднику. Тому необхідно визначити вплив контактів на ВАХ високоомного напівпровідника, коли співвідношення концентрацій вільних електронів в металі і напівпровіднику (N_M/N_0) відрізняються в десятки разів.

1. Геометрична схема, модель напівпровідника і система кінетичних рівнянь

Виберемо класичну геометрію: напівпровідник перерізом S і довжиною $d \sim 1$ см має на кінцях електричні контакти. Вісь OX направлена вздовж зразка і перпендикулярна до контактів. Нехтуючи крайовими ефектами (S достатньо велика) маємо в результаті однокоординатну систему з координатами електричних контактів при $x = 0$ та $x = d$. Відповідно, прикладена до електродів різниця потенціалів (U_0) створює у високоомному напівпровідниковому зразку електричне поле $(\vec{E_0})$ паралельне осі OX.

Для визначення інтегральних характеристик темнової провідності електронного напівпровідника необхідно знайти макроскопічні просторові розподіли концентрацій вільних $N(x)$ і локалізованих $n_i(x)$ електронів та напруженості електричного поля $\vec{E}(x)$ у зразку. Для спрощення розрахунків виберемо найпростішу модель напівпровідника у якому є тільки один тип глибоких пасток з концентрацією ν_i, які частково заповнені локалізованими електронами з мілких донорів ($c = n_i/\nu_i$ при $T = 0$ К і будемо називати рівнем заповнення глибоких пасток). Індекс "i" означає, що потім можна буде ввести в розрахунки інші мілкі незаповнені центри та більш глибокі заповнені пастки чи центри. Імовірність делокалізації електронів визначається: $w_i = w_{0i}\exp(-E_i/kT)$, а імовірність локалізації вільних носіїв буде: $N\sigma_i u(\nu_i - n_i)$, де u – теплова швидкість електронів у зоні провідності та σ_i – переріз локалізації вільних електронів на цьому типі глибоких центрів. Для вказаної моделі напівпровідника система кінетичних рівнянь [7] буде складатися з трьох рівнянь: рівняння для концентрацій вільних електронів, рівняння для локалізованих електронів та рівняння Пуассона:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial N}{\partial t} = w_i n_i - N\sigma_i u(\nu_i - n_i) + D^- \cdot \Delta N + \mu^- \cdot \vec{\nabla}(\vec{E} \cdot N) \\ \dfrac{\partial n_i}{\partial t} = N\sigma_i u(\nu_i - n_i) - w_i n_i \\ \vec{\nabla}\vec{E} = \dfrac{e(N_0 - N + n_{0i} - n_i)}{\varepsilon \cdot \varepsilon_0} \end{cases} \quad (1)$$

де: N_0 і n_{0i} відповідають рівноважним концентраціям електронейтрального напівпровідника. Для розрахунків просторових розподілів використовуємо дещо інший метод, ніж звичайно застосовується. Ми не будемо визначати і розв'язувати одне складне диференційне рівняння для потенціалу [3–6], оскільки відомо, що воно не має простих аналітичних розв'язків. Будемо шукати наближені розв'язки для системи кінетичних рівнянь, щоб бачити які спрощення будуть коректними, а розв'язки відповідатимуть реальній фізичній картині.

Для такої моделі в напівпровіднику присутні мілкі донори, які зумовлюють рівень заповнення глибоких пасток c і з яких електрони перейшли на глибокі пастки. Відповідно, для них також необхідно записати кінетичне рівняння в (1). Але, імовірність делокалізації з мілких пасток настільки велика, що можна сміливо нехтувати концентрацією електронів на цих пастках і, відповідно, нехтувати цим кінетичним рівнянням. Зауважимо, що для концентрації точкових глибоких центрів (ν_i) повинна виконуватись умова: середньостатистична відстань між центрами $(1/\sqrt[3]{\nu_i})$ повинна бути меншою за довжину вільного пробігу електрона в зоні провідності.

З цієї системи кінетичних рівнянь можна визначити стаціонарні рівноважні концентрації вільних і локалізова-

них електронів при температурі T для електронейтрального напівпровідника без електричних контактів. Для стаціонарного стану в обраній системі координат система кінетичних рівнянь набуває такого вигляду:

$$\begin{cases} 0 = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(D^{-} \dfrac{\partial N}{\partial x} + \mu^{-} E N \right) \\ 0 = N_0 \sigma_i u \left(\nu_i - n_{0i} \right) - w_i n_{0i} \\ \dfrac{\partial E}{\partial x} = \dfrac{e\left(N_0 - N + n_{0i} - n_i \right)}{\varepsilon \cdot \varepsilon_0} = 0 \end{cases} \quad (2)$$

З другого рівняння цієї системи одержуємо співвідношення між концентраціями вільних і локалізованих електронів, яке буде справедливе для стаціонарних станів при $N_0 << \left(\nu_i - n_{0i} \right)$:

$$N_0 = \frac{w_i}{\sigma_i u \nu_i} \cdot \frac{n_{i0}}{1 - n_{i0}/\nu_i} = \frac{w_i}{\sigma_i u} \cdot \frac{c}{1-c} \quad (3)$$

Графік цієї залежності наведено на рис. 1. Використовуючи відоме співвідношення між перерізом локалізації на пастку та частотним фактором делокалізації з цієї пастки [8, 9]: $\dfrac{w_{0i}}{\sigma_i u} = N_C$ де: $N_C = 2\left(\dfrac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$ – ефективна густина станів для електронів у зоні провідності, одержуємо співвідношення для концентрації вільних електронів у вигляді:

$$N_0 = \frac{N_C \exp\left(-E_i/kT \right)}{\nu_i} \cdot \frac{n_i}{1 - n_i/\nu_i} = \frac{A \cdot n_i}{1 - n_i/\nu_i} = A \cdot \nu_i \cdot \frac{c}{1-c} \quad (4)$$

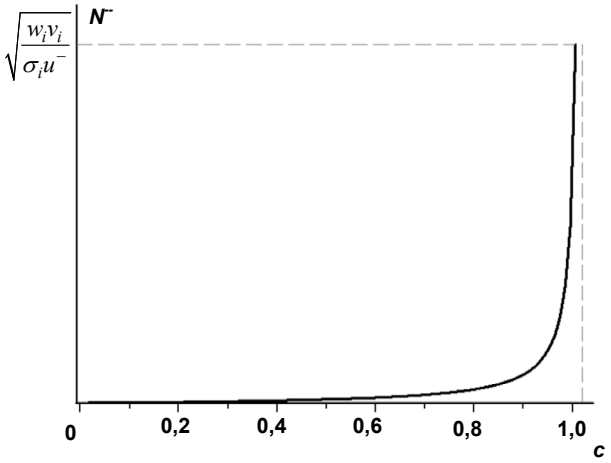

Рис. 1. Залежність концентрації вільних електронів від рівня заповнення глибокої пастки

Слід зазначити, що безрозмірний множник $A = \dfrac{N_C}{\nu_i} \exp\left(-E_i/kT \right) << 1$, якщо ці пастки глибокі (тобто, виконується умова $N << n_i$). Співвідношення (3) і (4) будуть справедливими при $c < 0{,}99$, тобто доки концентрація вільних електронів буде значно меншою за концентрацію вільних місць на глибоких пастках $\left(N_0 << \nu_i - n_i \right)$. При $c \to 1$ друге рівняння системи (2) необхідно переписати у вигляді:

$$c \to 1: \quad N_0 \sigma_i u \left[\nu_i - \left(n_{0i} - N_0 \right) \right] = w_i \left(n_{0i} - N_0 \right)$$

та $$c = 1: \quad N_0 \sigma_i u N_0 = w_i \left(\nu_i - N_0 \right)$$

Розв'язуючи квадратичне рівняння відносно N_0 одержуємо:

$$N_0 = \frac{1}{2} \cdot \left\{ \sqrt{\left[\frac{w_i}{\sigma_i u} + \left(1 - c \right) \nu_i \right]^2 + \frac{4 w_i c \nu_i}{\sigma_i u}} - \left[\frac{w_i}{\sigma_i u} + \left(1 - c \right) \nu_i \right] \right\}$$

та $N_{0\max} = \sqrt{\dfrac{w_i \nu_i}{\sigma_i u}}$

Максимальна концентрація вільних електронів обмежена значенням $N_{0\max} = \sqrt{\dfrac{w_i \nu_i}{\sigma_i u}} = \sqrt{N_C \nu_i}$ і ця величина є достатньо великою, щоб для високоомних напівпровідників користуватися рівнянням (4).

Таким чином маємо, що концентрації вільних носіїв будуть значно меншими за концентрації локалізованих на глибоких пастках. Це дозволяє в рівнянні Пуассона нехтувати концентраціями вільних носіїв у порівнянні з локалізованими. Тобто, саме локалізовані електрони можуть створювати додаткове електричне поле у напівпровідниковому зразку.

Можна розрахувати середньостатистичний час знаходження вільного електрона в зоні провідності $\left(\tau_0 \right)$ як відношення імовірності знаходження електрона у вільному стані до імовірності його переходу у вільний стан з локалізованого (рис. 2) :

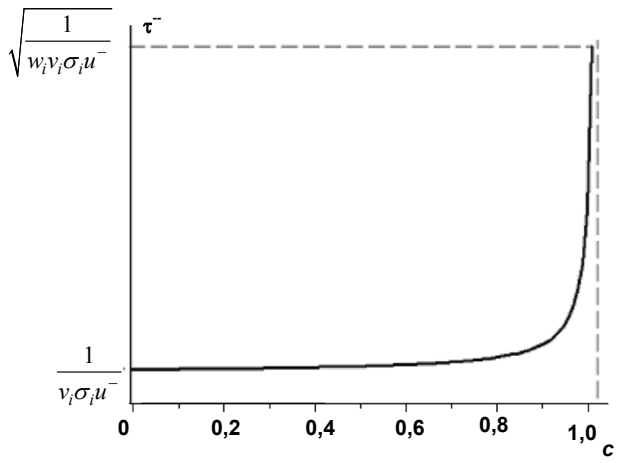

Рис. 2. Залежність часу життя вільного електрона від рівня заповнення глибокої пастки

$$\tau_0 = \frac{w_i}{\sigma_i u \nu_i} \cdot \frac{n_i}{\left(1 - c \right)} \Big/ w_i n_i = \frac{1}{\sigma_i u \nu_i \left(1 - c \right)}.$$

Аналогічно, для

$$c = 1: \quad \tau_{0\max} = \frac{1}{\sqrt{w_i \nu_i \sigma_i u}} \quad (5)$$

По порядку величини при малих концентраціях домішок чи точкових структурних дефектів $\left(\nu \le 10^{13}\ \text{см}^{-3} \right)$ ця величина буде становити порядку $\sim 10^{-6}\ c$ і змінюватись в залежності від рівня компенсації напівпровідника від $\tau_{0\min} = 1/\sigma_i u \nu_i$ до $\tau_{0\max} = 1/\sqrt{w_i \nu_i \sigma_i u}$. Такий малий час життя вільних носіїв свідчить, що стаціонарний стан буде встановлюватись дуже швидко (<< 1 с), а тому для встановлення вольт-амперних характеристик (ВАХ) високоомних напівпровідників достатньо розглядати лише стаціонарні розв'язки кінетичних рівнянь.

2. Контакт метал – напівпровідник і граничні умови для концентрацій електронів

Нанесення електричних металевих контактів не змінює загальну електронейтральність зразка. Тому, для *центральної частини* напівпровідникового зразка, незалежно від крайових умов і при закороченних контактах $(U_0 = 0B)$, маємо рівноважні концентрації для вільних (4) та локалізованих електронів:

$$n_0 = \frac{N_0}{\left(A + N_0/\nu_i\right)}, \quad \text{або} \quad \frac{n_0}{\nu_i} = \frac{N(x)/N_0}{\left(\frac{1-c}{c} + N(x)/N_0\right)} \qquad (6)$$

Оскільки струм відсутній і маємо симетрію відносно $x = d/2$, то для першого рівняння системи (2) буде: $D^- \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} = 0$, $\frac{\partial(E \cdot N)}{\partial x} = 0$, $E = 0$. Відповідно, рівняння Пуассона також дає: $\frac{\partial E}{\partial x} = 0$. Це цілком логічно з фізичної точки зору і означає, що в центральній частині зразка маємо постійні концентрації вільних і локалізованих електронів, які відповідають електронейтральності зразка.

В *приконтактній області* напівпровідника ситуація кардинально змінюється за рахунок іншої концентрації електронів у металі. Абсолютно точне співпадання φ_M і φ_H явище надзвичайно малоімовірне, а тому необхідно розглянути випадки, коли концентрації електронів у металі на рівні зони провідності напівпровідника (N_M) відрізняється від концентрації вільних електронів у напівпровіднику (N_0). Слід зазначити, що для випадку $N_M \neq N_0$ зміна температури на декілька десятків градусів помітно не змінить N_M, а концентрація електронів в зоні провідності напівпровідника може змінитися на порядки. З другого боку, різні зразки одного високоомного напівпровідникового матеріалу будуть мати різні концентрації неконтрольованих домішок та точкових дефектів, що призведе до різної концентрації вільних електронів і може навіть відрізнятися на порядки. Тому, однаковий металевий контакт на різних зразках може давати різні контактні явища. Таким чином, для визначення інтегральних ВАХ темнової провідності напівпровідника необхідно визначити просторові розподіли вільних і локалізованих електронів при закорочених контактах та при прикладеній до зразка різниці потенціалів, що дозволить визначити густину струму при різних напругах.

$N_M = N_0$. В цьому випадку наявність електричних металевих контактів у напівпровідника не змінює концентрацію вільних електронів в усіх ділянках зразка. При прикладанні до контактів різниці потенціалів U_0 у зразку з'явиться постійне електричне поле $E_0 = U_0/d$ направлене вздовж осі OX. Це поле обумовить дрейфовий рух вільних електронів з постійною швидкістю $\left(u_{др} = -\mu^- E_0\right)$, причому до пробійних напруг $\left(E_0 \leq 5000\ \text{В/см}\right)$ в області кімнатних температур, теплова швидкість електронів буде значно більшою за дрейфову швидкість. Це означає, що характер руху вільних електронів в зоні провідності буде залишатися дифузійно-дрейфовим і підпорядковуватися системі кінетичних рівнянь (1). Система кінетичних рівнянь для стаціонарного стану набуває вигляду:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x}\left(D^- \frac{\partial N}{\partial x} + \mu^- E_0 N\right) = 0 \\ N_0 \sigma_i u\left(\nu_i - n_{0i}\right) = w_i n_{0i} \\ \frac{\partial E}{\partial x} = \frac{e\left(n_{0i} - n_{0i}\right)}{\varepsilon \cdot \varepsilon_0} = 0 \end{cases}$$

але при незмінних концентраціях N_0 і n_{0i} маємо $\frac{\partial E}{\partial x} = 0$ і $\frac{\partial j}{\partial x} = 0$. Густина струму (j) буде:

$$j = eD^- \frac{\partial N}{\partial x} + e\mu^- E_0 N = e\mu^- E_0 N_0 \qquad (7)$$

В результаті маємо виконання закону Ома:

$$i(U_0) = \iint_S \frac{e\mu^- N_0 U_0}{d} dS \sim U_0, \qquad (8)$$

тобто, лінійну залежність темнового струму від прикладеної напруги до напівпровідникового зразка. Слід зазначити, що цей розв'язок не враховує залежність $w_i(U_0)$ – ефект Пула-Френкеля [10, 11].

$N_M < N_0$. Для цього випадку очевидно, що частина вільних електронів з напівпровідника перейде в метал і їх концентрації при $x = 0$ та $x = d$ стануть однаковими:

$$N(x = 0) = N(x = d) = N_M \qquad (9)$$

Саме ця умова і буде граничною умовою для системи рівнянь (2). Це означає, що в металі з'явиться додатковий від'ємний заряд, а у напівпровіднику – такий саме по величині додатний заряд. В металі цей заряд буде знаходитись в дуже тонкому (декілька атомних шарів) поверхневому шарі, а у напівпровіднику – в приконтактній області за рахунок зміни концентрації локалізованих електронів. Ці заряди будуть створювати електричне поле $E_C(x)$.

$N_M > N_0$. Для цього випадку буде навпаки – частина електронів з металу перейде у напівпровідник і також буде створюватись електричне поле $E_C(x)$, але направлене вже в протилежному напрямку.

Очевидно, що максимум величини цього приконтактного поля буде при $x = 0$ та $x = d$ і поступово буде зменшуватись з відстанню від контакту. Оскільки маємо фізичну симетрію відносно середини напівпровідникового зразка, то достатньо розглянути приконтактні явища тільки для одного контакту $(x = 0)$ при протилежних напрямках зовнішнього поля. А для другого контакту буде те ж саме, якщо замінити координату x на $(d - x)$.

3. Просторові розподіли концентрацій вільних і локалізованих електронів при *U* = 0

$N_M < N_0$. Спочатку визначимо просторові розподіли концентрацій вільних і локалізованих електронів при закороченних між собою провідником електричних контактів, тобто при $U_0 = 0$. В цьому випадку струм в замкненому колі дорівнює нулю. З першого рівняння системи (2) одержуємо простий зв'язок між концентрацією вільних електронів і потенціалом:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[D^{-}\frac{\partial N(x)}{\partial x}+\mu^{-}E_C(x)N(x)\right]=0\Rightarrow\frac{\partial N}{\partial x}=-\frac{\mu^{-}}{D^{-}}E_C N\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\frac{\partial}{\partial x}(\ln N)=-\frac{\mu^{-}}{D^{-}}E_C\Rightarrow d(\ln N)=-\frac{e}{kT}E_C dx=-\frac{e}{kT}dU\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\ln\left[\frac{N(x_1)}{N(x_2)}\right]=-\frac{e}{kT}\left[U(x_1)-U(x_2)\right]\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\frac{N(x_1)}{N(x_2)}=\exp\left\{\frac{e}{kT}\left[U(x_1)-U(x_2)\right]\right\}.$$

Це дає відоме співвідношення [12, 13] в якому U_C – контактна різниця потенціалів:

$$N(x=0)=N_M=N_0\exp\left(-\frac{eU_C}{kT}\right) \qquad (10)$$

На просторові розподіли вільних і локалізованих електронів та розміри приконтактної області будуть суттєво впливати співвідношення концентрацій N_M/N_0 (тобто U_C) та c – рівень заповнення глибоких пасток. Необхідно ввести параметр для характеристики розміру приконтактної області L_C, який по аналогії з [12, 13], будемо називати довжиною екранування.

Наближений розв'язок системи кінетичних рівнянь (2) шукаємо у вигляді:

$$N(x)=N_0\exp\left[C_1\exp\left(-\frac{x}{L_C}\right)\right],\ E(x)=E_C\exp\left(-\frac{x}{L_C}\right) \qquad (11)$$

Фактично використовуємо експоненційну залежність для потенціалу. Це співвідношення є розв'язком першого рівняння системи (2) при $C_1=-\frac{eE_CL_C}{kT}=-\frac{eU_C}{kT}$ та $U_C=E_CL_C$, яке далі використовуємо для визначення L_C і E_C. З другого рівняння системи (2) одержуємо співвідношення для концентрації локалізованих носіїв:

$$n_i(x)=\frac{N_0\exp\left[-\frac{eU_C}{kT}\exp\left(-\frac{x}{L_C}\right)\right]}{A+\frac{N_0}{\nu_i}\exp\left[-\frac{eU_C}{kT}\exp\left(-\frac{x}{L_C}\right)\right]},$$

$$\frac{n_i(x)}{\nu_i}=\frac{\frac{N(x)}{N_0}}{\left(\frac{1-c}{c}\right)+\frac{N(x)}{N_0}}= \qquad (12)$$

$$=\frac{\exp\left[-\frac{eU_C}{kT}\exp\left(-\frac{x}{L_C}\right)\right]}{\left(\frac{1-c}{c}\right)+\exp\left[-\frac{eU_C}{kT}\exp\left(-\frac{x}{L_C}\right)\right]}$$

Одержану залежність для $n_i(x)$ необхідно підставляти в рівняння Пуассона для визначення параметра L_C, а головне – це перевірка розв'язку, оскільки функціональна залежність для $E(x)$ вже задана (11) і використовувалась в першому рівнянні системи (2). Тому, для виконання цих умов застосовуємо апроксимацію залежності (12) близькою функцією:

$$n_i(x)=n_{0i}\left[1-\left(\frac{n_{0i}-n_{Ci}}{n_{0i}}\right)\exp\left(-\frac{x}{L_C}\right)\right], \qquad (13)$$

$$n_{Ci}=n_i(x=0)=\frac{c\cdot\nu_i\cdot\exp\left(-\frac{eU_C}{kT}\right)}{1-c\left[1-\exp\left(-\frac{eU_C}{kT}\right)\right]}$$

$n_{Ci}=n_i(x=0)$ – гранична концентрація локалізованих електронів. Порівняльний аналіз апроксимуючої функції (13) із залежністю (12) показує, що до $N_0/N_M\le 10$ спостерігається дуже гарне їх співпадання, а при $N_0/N_M\le 50\,(U_C\sim 0{,}1eV)$ ще можна застосовувати цю апроксимацію. Розраховані просторові розподіли концентрацій вільних електронів наведені на рис. 3 для трьох значень U_C. А на рис. 4 приведені розраховані по (12) відносні концентрації локалізованих електронів та їх апроксимація (13) для трьох значень U_C та різних рівнях заповнення електронами глибоких пасток.

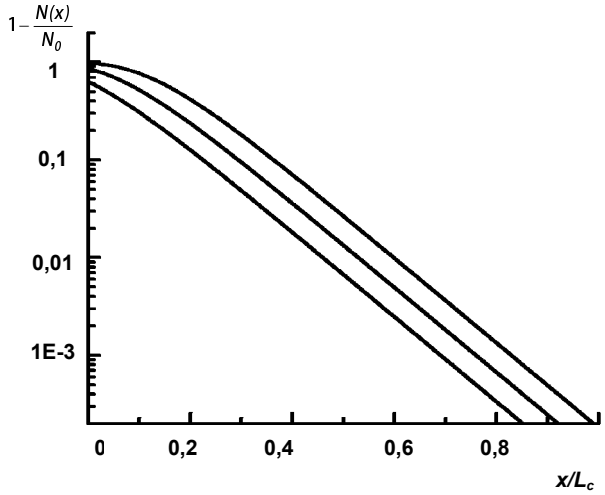

Рис. 3. Розраховані відносні просторові залежності $\left[1-N(x)/N_0\right]$ для різних U_C:

$\frac{eU_C}{kT}=-1$ **(1);** $\frac{eU_C}{kT}=-2$ **(2);** $\frac{eU_C}{kT}=-4$ **(3)**

Підстановка експоненти (13) в третє рівняння системи (2) дає залежність для поля:

$$E(x)=-\frac{eL_C}{\varepsilon\varepsilon_0}(n_{0i}-n_{Ci})\exp\left(-\frac{x}{L_C}\right) \qquad (14)$$

Яка співпадає з (11) та $U_C=E_CL_C$ при:

$$L_C=\sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0U_C\left\{1-c\left[1-\exp\left(-\frac{eU_C}{kT}\right)\right]\right\}}{e\,\nu_i c(1-c)\left[1-\exp\left(-\frac{eU_C}{kT}\right)\right]}}$$

$$E_C=-\frac{U_C}{L_C}=-\sqrt{\frac{e\,U_C\,\nu_i c(1-c)\left[1-\exp\left(-\frac{eU_C}{kT}\right)\right]}{\varepsilon\varepsilon_0\left\{1-c\left[1-\exp\left(-\frac{eU_C}{kT}\right)\right]\right\}}} \qquad (15)$$

Слід зазначити суттєвий вплив рівня заповнення глибоких пасток (c) на L_C та E_C. На рис. 5 наведені ці параметри для напівпровідника з параметрами: $\varepsilon=8{,}1$ (ZnSe), $v_i\sim10^{13}$ см$^{-3}$ для різних значень U_C.

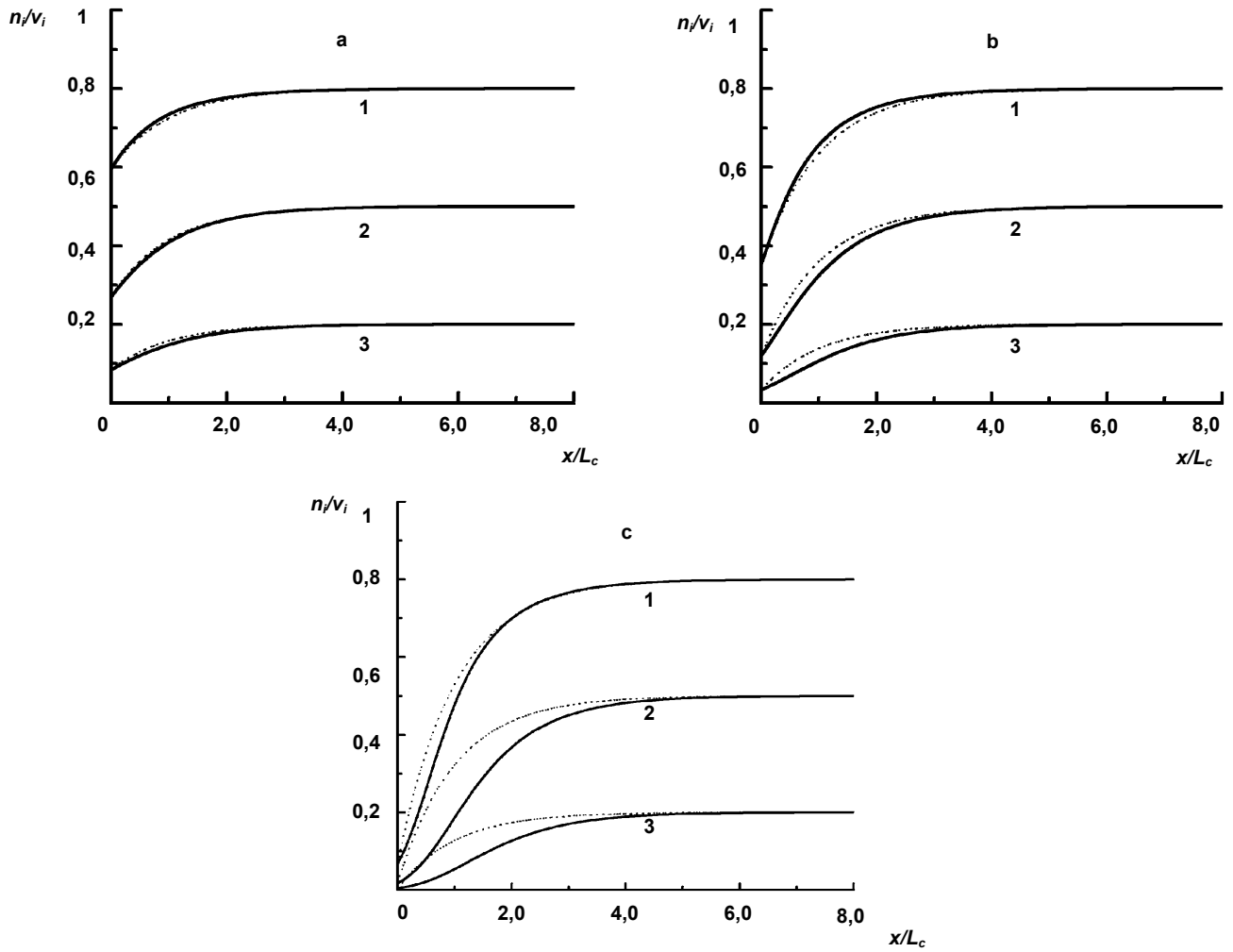

Рис. 4. Розраховані відносні просторові залежності локалізованих електронів $n_i(x)/v_i$ по (12) (суцільні лінії) та їх апроксимації (13) (пунктирні лінії) для $\frac{eU_C}{kT} = -1$ (a); $\frac{eU_C}{kT} = -2$ (b); $\frac{eU_C}{kT} = -4$ (c) при різних рівнях заповнення пасток: $c = 0,8$ (1); $c = 0,5$ (2); $c = 0,2$ (3)

Можна порівняти одержану залежність для L_C з довжиною екранування Дебая [5, 12]: $L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0 kT}{e^2 N_0}}$, яка при малих концентраціях вільних електронів переходить в $L_D = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0 kT}{e^2 \nu_i}}$ і дає значення порядку декілька мікрон. Оскільки довжина екранування Дебая розраховується для $U_C = kT/e$, то маємо співпадання формул для L_D і L_C. Це не дивно, оскільки ці параметри визначають глибину, на якій потенціал в напівпровіднику зменшується в e разів, а важливим є те, що два різних підходи: з боку знаходження розв'язку рівняння для потенціалу та з боку знаходження просторових розподілів концентрацій вільних та локалізованих електронів, дають однаковий результат.

Слід зазначити, що не тільки експоненційні залежності (11) є розв'язком рівняння для вільних носіїв. Також гіперболічна залежність для $U(x) = U_C / (1 + x/L_C)$ та, відповідна залежність для поля $E(x) = E_C (1 + x/L_C)^{-2}$, будуть розв'язками першого рівняння системи (2). Але, одержані при цьому залежності для $n_i(x)$ зовсім не задовольняють рівняння Пуассона.

$N_M > N_0$. В цьому випадку деяка кількість електронів будуть переходити з металу в напівпровідник аж поки не зрівняються їх концентрації на границі (9) і згенерується поле $E_C(x)$. При цьому залежність (10) набуває вигляду:

$$N(x=0) = N_M = N_0 \exp\left(+\frac{eU_C}{kT}\right) \qquad (16)$$

Залежність (6) показує, що достатньо велика концентрація вільних електронів біля контакту повинна забезпечуватись необхідною концентрацією локалізованих електронів. Розв'язок першого рівняння системи (2) знову шукаємо у вигляді:

$$N(x) = N_0 \exp\left[+\frac{eU_C}{kT}\exp\left(-\frac{x}{L_C}\right)\right],$$
$$E(x) = E_C \exp\left(-\frac{x}{L_C}\right) \qquad (17)$$

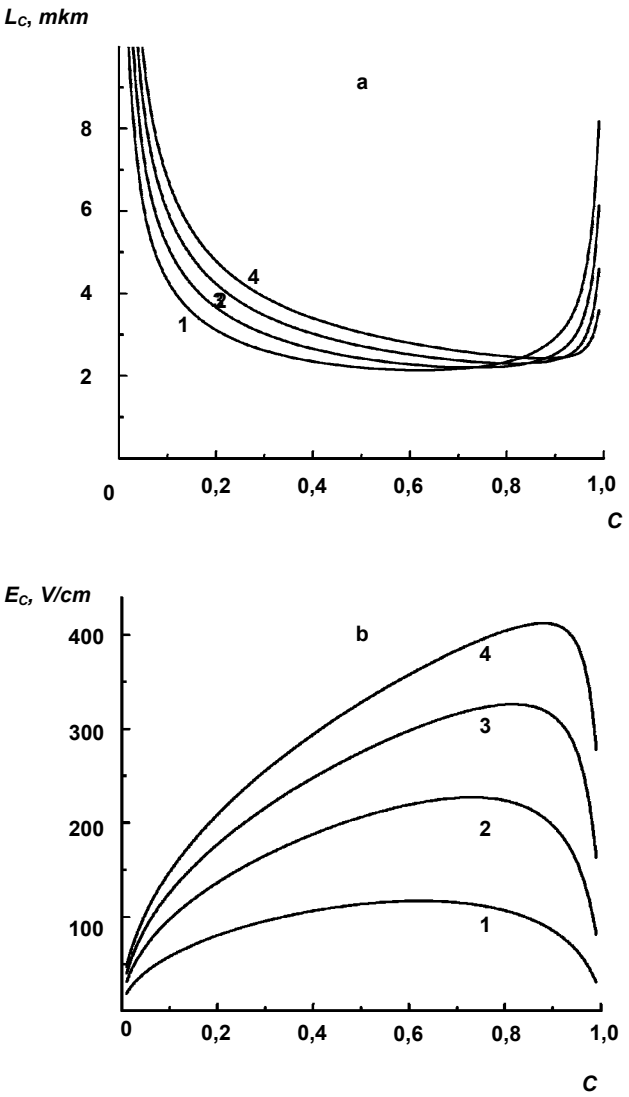

Рис. 5. Залежність L_C (a) та E_C (b) від рівня заповнення глибоких пасток c для різних U_C:

$\frac{eU_C}{kT} = -1$ **(1);** $\frac{eU_C}{kT} = -2$ **(2);** $\frac{eU_C}{kT} = -3$ **(3);** $\frac{eU_C}{kT} = -4$ **(4)**

Ці залежності задовольняють рівняння для вільних носіїв при $U_C = E_C L_C$. Аналогічно для концентрацій локалізованих електронів одержуємо:

$$n_i(x) = n_{0i}\left[1 + \left(\frac{n_{Ci} - n_{0i}}{n_{0i}}\right)\exp\left(-\frac{x}{L_C}\right)\right],$$

$$n_{Ci} = \frac{c \cdot v_i \cdot \exp\left(\frac{eU_C}{kT}\right)}{1 - c\left[1 - \exp\left(\frac{eU_C}{kT}\right)\right]} \qquad (18)$$

Розраховані просторові розподіли концентрацій вільних електронів наведені на рис. 6 для трьох значень U_C. А на рис. 7a, b, c приведені розраховані відносні концентрації локалізованих електронів та їх апроксимація (18) для трьох значень U_C та різних рівнях заповнення електронами глибоких пасток.

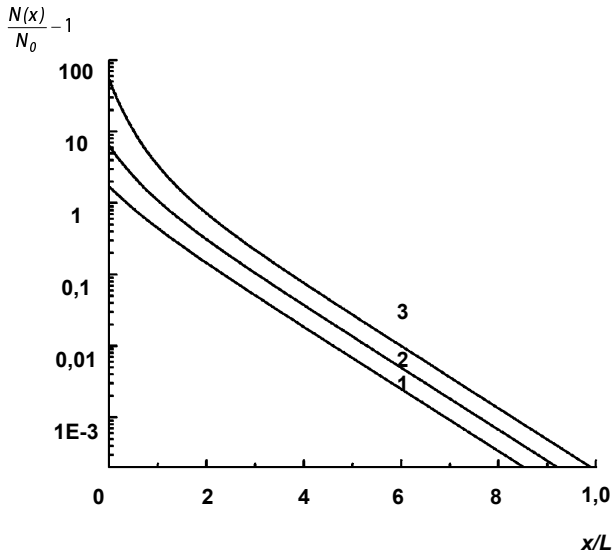

Рис. 6. Розраховані відносні просторові залежності $\left[N(x)/N_0 - 1\right]$ для різних U_C:

$\frac{eU_C}{kT} = 1$ **(1);** $\frac{eU_C}{kT} = 2$ **(2);** $\frac{eU_C}{kT} = 4$ **(3)**

Відповідно, для констант L_C і E_C одержуємо співвідношення:

$$L_C = \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0 U_C\left\{1 + c\left[\exp\left(\frac{eU_C}{kT}\right) - 1\right]\right\}}{e\,\nu_i c(1-c)\left[\exp\left(\frac{eU_C}{kT}\right) - 1\right]}}$$

$$E_C = \frac{U_C}{L_C} = \sqrt{\frac{e\,U_C\,\nu_i c(1-c)\left[\exp\left(\frac{eU_C}{kT}\right) - 1\right]}{\varepsilon\varepsilon_0\left\{1 + c\left[\exp\left(\frac{eU_C}{kT}\right) - 1\right]\right\}}} \qquad (19)$$

Розраховані величини L_C і E_C наведені на рис. 8 для того ж напівпровідника, що і на рис. 5.

І хоча добутки $L_C E_C = U_C$ для обох випадків $(U_C < 0,\ U_C > 0)$ однакові, а криві для L_C і E_C – симетричні, самі константи будуть між собою співпадати тільки при $c = 0,5$.

Таким чином, неспівпадіння концентрацій N_M і N_0 призводить до появи значного приконтактного електричного поля (сотні В/см), яке експоненційно зменшується в напівпровіднику з відстанню від контакту.

Розглянемо також таку апроксимуючу функцію для концентрації вільних носіїв в приконтактній області, яка далі буде дуже важливою:

$$N(x) = N_0 \cdot \frac{1 + a \cdot \exp(-x/L_2)}{1 - b \cdot \exp(-x/L_2)},$$

$$\frac{1+a}{1-b} = \frac{N_M}{N_0} \quad \Rightarrow \quad a = (1-b)\frac{N_M}{N_0} - 1 \qquad (20)$$

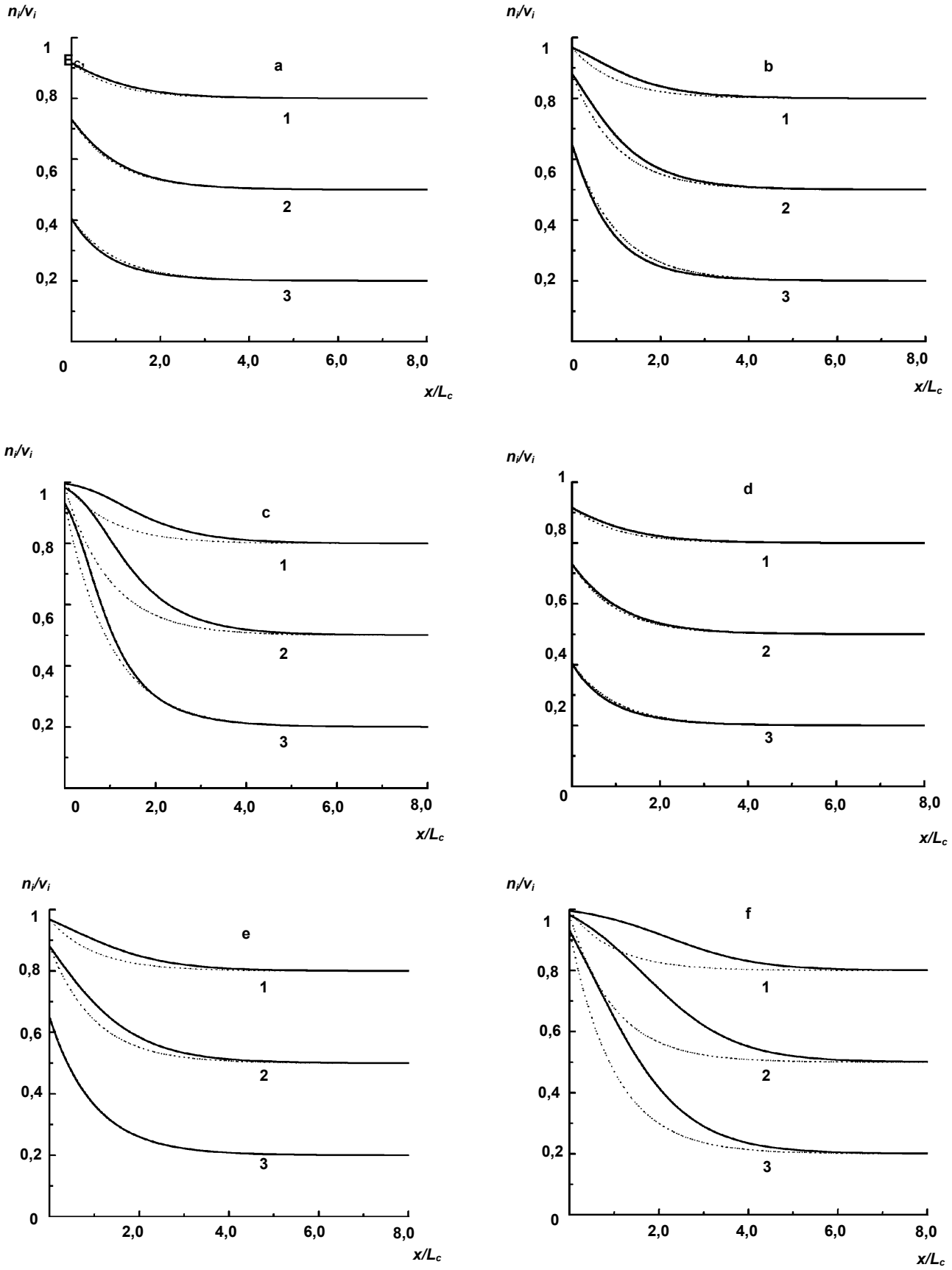

Рис. 7. Розраховані відносні просторові залежності локалізованих електронів $n_i(x)/\nu_i$ по (т. 12) (суцільні лінії) та їх апроксимації (т. 13) (пунктирні лінії) для $\frac{eU_C}{kT}=1$ (a) і $\frac{eU_C}{kT}=4$ (b) при різних рівнях заповнення пасток: $c=0,8$ (1); $c=0,5$ (2); $c=0,2$ (3)

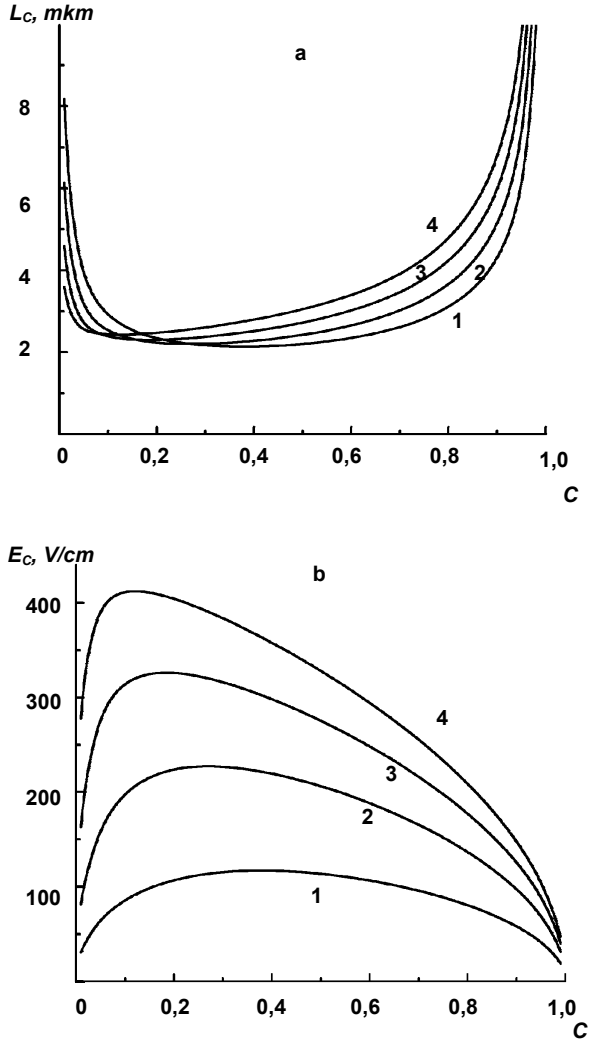

Рис. 8. Залежність L_C (a) та E_C (b) від рівня заповнення глибоких пасток c для різних U_C:

$\frac{eU_C}{kT} = 1$ **(1);** $\frac{eU_C}{kT} = 2$ **(2);** $\frac{eU_C}{kT} = 3$ **(3);** $\frac{eU_C}{kT} = 4$ **(4)**

Підбираючи безрозмірний параметр b можна суттєво змінювати функціональну залежність $N(x)$. Кінетичне рівняння для вільних носіїв перепишемо у вигляді безрозмірних функцій і позначимо:

$$0 = \frac{D^-}{\mu^-} \cdot \frac{1}{E_C N_0} \cdot \frac{\partial N(x)}{\partial x} + \frac{E_C(x) N(x)}{E_C N_0} = \\ = Y_{C1}(x) + Y_{C2}(x) = Y_C(x) \qquad (21)$$

На рис. 9. наведені ці залежності при досягнутому мінімальному відхиленні функції $Y_C(x)$ від нуля при $E_C(x) = E_C \exp(-x/L_C)$. Таким чином, підбираючи параметр b апроксимуючої функції (20) практично можна задовольнити кінетичне рівняння для вільних носіїв. При цих параметрах на рис. 7d, e, f наведені розраховані з використанням (6) залежності $n_i(x)/\nu_i$ (суцільні лінії) та їх експоненційні апроксимації (пунктирні лінії). Видно, що відповідні графіки a-d, b-e, c-f практично не відрізняються між собою. Це означає. Що залежність (20) дуже близька до залежності (11) і не покращує апроксимацію $n_i(x)$ для $U_0 = 0$.

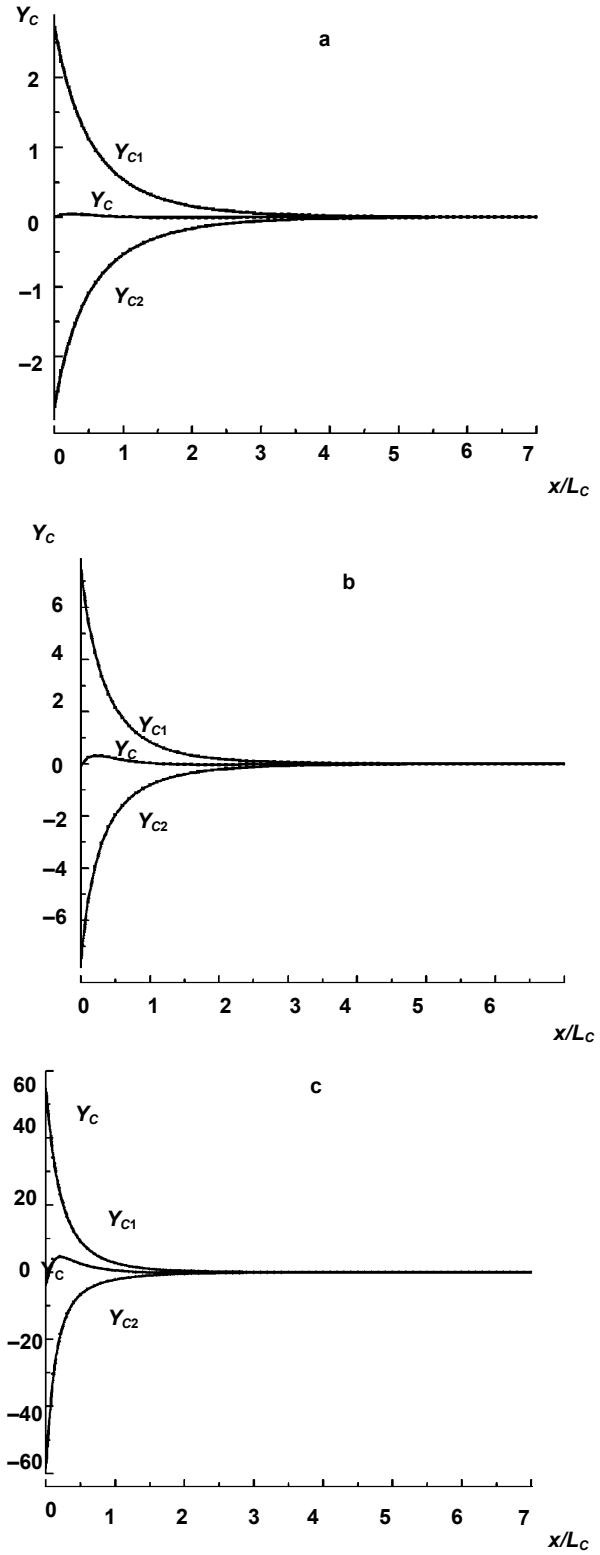

Рис. 9. Підібрані залежності $Y_{C1}(x)$, $Y_{C2}(x)$ і $Y_C(x)$ для різних U_C:

$\frac{eU_C}{kT} = 1$ **(a);** $\frac{eU_C}{kT} = 2$ **(b);** $\frac{eU_C}{kT} = 4$ **(c)**

Таким чином, одержані наближені розв'язки для просторових розподілів концентрацій вільних і локалізованих електронів та приконтактного електричного поля дозволяють перейти до розгляду впливу зовнішнього поля на ці просторові концентрації.

4. Наявність мілких пасток в реальних напівпровідниках

Реальні високоомні напівпровідники завжди мають більш мілкі рівні за *i*-й. Необхідно встановити вплив цих мілких рівнів на приконтактні просторові розподіли електронів. При $T = 0$ усі мілкі рівні будуть незаповненими і рівень Фермі буде на енергетичній схемі співпадати з частково заповненим *i*-м рівнем. Підвищення температури призведе до появи вільних електронів в зоні провідності і частковому заповненню мілких рівнів. Рівень Фермі при цьому залишиться біля *i*-го рівня і буде в межах $\sim kT$ або вище (якщо $c > 0{,}5$), або нижче (при $c < 0.5$) цього рівня. Система кінетичних рівнянь для рівноважного стану при наявності більш мілких рівнів $(i-1, i-2, ...)$, змінюється з (2) на:

$$\begin{cases} 0 = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(D^- \dfrac{\partial N}{\partial x} + \mu^- E N\right) - Nu\sum\limits_i \sigma_i\left(\nu_i - n_i\right) + \sum\limits_i w_i n_i = \\ = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(D^- \dfrac{\partial N}{\partial x} + \mu^- E N\right) \\ 0 = N\sigma_i u\left(\nu_i - n_i\right) - w_i n_i \\ 0 = N\sigma_{i-1} u\left(\nu_{i-1} - n_{i-1}\right) - w_{i-1} n_{i-1} \\ \ldots \\ \dfrac{\partial E}{\partial x} = \dfrac{e}{\varepsilon\varepsilon_0}\left[\left(N_0 - N\right) + \sum\limits_i \left(n_{0i} - n_i\right)\right] = 0 \end{cases} \quad (22)$$

Фактично, в системі з'являються рівняння для локалізованих на мілких пастках носіїв заряду. Якщо різниця енергій $\Delta E_{i,\,i-1} = \left|E_i - E_{i-1}\right| \geq 0{,}1$ еВ, а концентрації ν_i і ν_{i-1} одного порядку, то легко оцінити концентрації електронів на цьому мілкому рівні:

$$\frac{n_{i-1}}{\nu_{i-1}} = \frac{1}{1 + \exp\left(\dfrac{E_{i-1} - F}{kT}\right)} \approx \exp\left(-\frac{\Delta E_{i,\,i-1}}{kT}\right) \quad (23)$$

При кімнатній температурі залишається справедливим $n_{i-1} << n_i$, навіть якщо концентрація ν_{i-1} на порядок перевищує ν_i. Але, поява мілких рівнів не змінює рівняння для концентрацій вільних електронів та рівняння для концентрацій локалізованих електронів на *i*-му рівні. Залишається справедливим і співвідношення (4) між концентраціями вільних і локалізованих електронів. Фактично, поява мілких рівнів призводить до часткового перерозподілу по локальним рівням локалізованих електронів (< 1 %) не змінюючи їх загальної концентрації. Трохи зменшується лише рівень заповнення електронами *i*-го рівня. Незмінною залишається і концентрація вільних електронів: збільшення актів делокалізації електронів з мілких рівнів компенсується зменшенням їх часу життя в зоні за рахунок збільшення імовірності локалізації на мілкі центри.

Поява мілких пасток не впливає на просторову зміну концентрації вільних електронів в приконтактній області, а концентрація локалізованих носіїв на мілких пастках буде пропорційна зміні концентрації вільних носіїв:

$$n_{i-1}(x) = N(x)\frac{\nu_{i-1}}{N_C}\exp\left(\frac{E_{i-1}}{kT}\right) \quad (24)$$

Фактично, мілкі пастки для електронів змінюють тільки рівняння Пуассона в (22) де локалізовані електрони розподіляються між *i*-м рівнем та мілкими пасткам. А величина приконтактного електричного поля E_C визначається тільки загальною кількістю локалізованих носіїв, яка залишається незмінною.

Таким чином, наявність мілких пасток в реальних матеріалах не змінює запропоновану модель напіпровідника і, відповідно, одержані просторові розподіли вільних і локалізованих електронів та приконтактного електричного поля E_C.

5. Вплив зовнішнього поля $\left(\overrightarrow{E_0} \uparrow\uparrow \overrightarrow{E_C}\right)$ на концентрації електронів при $N_M > N_0$

Прикладення до електричних контактів різниці потенціалів U_0 призведе до появи електричного поля в напівпровіднику і, як наслідок, протікання електричного струму. Система кінетичних рівнянь (2) не змінюється, але вираз, який визначає загальний потік вільних носіїв заряду, вже буде дорівнювати не нулю, а постійній величині.

Для знаходження ВАХ необхідно встановити просторові розподіли вільних і локалізованих електронів та залежність напруженості поля від координати. Використовуємо той факт, що величина струму однакова в усіх ділянках зразка.

Для центральної частини зразка, де концентрація вільних електронів залишається постійною N_0 і відсутнє приконтактне поле E_C, для густини струму можна записати:

$$j = eD^- \frac{\partial N}{\partial x} + e\mu^- E_0 N = e\mu^- E_0 N_0 \quad (25)$$

Легко довести, що $\partial N/\partial x = 0$. Нехай концентрація вільних електронів повільно змінюється так, що $\partial N/\partial x = Const \neq 0$. Тоді вздовж зразка $N(x) = N_0 + Const \cdot x$ і поле також повинно змінюватись, щоб добуток $N(x)E(x)$ залишався постійним. Ця умова обумовлена законом збереження електричного заряду і його наслідком – величина струму однакова в усіх ділянках замкненого кола. Така зміна $N(x)$ від координати x означає, що поле $E(x)$ повинно спадати по гіперболі першого порядку. Зміна $N(x)$ призведе до зміни концентрації локалізованних електронів і згідно (6) також повинна лінійно збільшуватись. Лінійне збільшення концентрації електронів $n_i(x)$ і $N(x)$ згідно рівняння Пуассона повинно давати зменшення величини поля по параболі. Якщо на невеликому відрізку ще можна підібрати функціонально наближене співпадання гіперболи і параболи, то для значних відрізків – це стає неможливим. Таке протиріччя свідчить, що тільки постійні значення N_0, n_{0i} та E_0 задовольняють систему рівнянь (2) в центральній частині зразка. В результаті для цієї частини зразка маємо виконання закону Ома, тобто, лінійну залежність темнового струму від напруженості поля.

Знаючи величину потоку вільних електронів в одній частині напівпровідникового зразка, можна записати систему рівнянь для вільних і локалізованих носіїв заряду (в нашому випадку електронів) у вигляді:

$$\begin{cases} D^- \dfrac{\partial N(x)}{\partial x} + \mu^- E(x) N(x) = \pm\mu^- E_0 N_0 \\ 0 = N_0\sigma_i u\left(\nu_i - n_{0i}\right) - w_i n_{0i} \\ \dfrac{\partial E}{\partial x} = \dfrac{e\left[n_i(x) - n_{0i}\right]}{\varepsilon \cdot \varepsilon_0} \end{cases} \quad (26)$$

Знак $\pm$ в першому рівнянні визначається напрямком зовнішнього поля. Далі необхідно встановити просторові розподіли вільних і локалізованих електронів та залежність напруженості поля від координати в усіх ділянках зразка.

В *приконтактних областях* граничні умови (9) залишаться незмінними при появі зовнішнього поля. Це означає, що на границі з металевим електричним контактом концентрації вільних електронів будуть залишатися N_M, а при збільшенні відстані від електродів – монотонно змінюватись до значення концентрації в центральній частині зразка N_0. За рахунок дифузійного руху вільних носіїв ця залежність буде монотонною разом зі своєю похідною.

Необхідно розглянути два випадки: 1) зовнішнє електричне поле співпадає по напрямку з $\overrightarrow{E_C}$ $\left(\overrightarrow{E_0} \uparrow\uparrow \overrightarrow{E_C}\right)$ та 2) ці поля направлені протилежно $\left(\overrightarrow{E_0} \uparrow\downarrow \overrightarrow{E_C}\right)$.

$\overrightarrow{E_0} \uparrow\uparrow \overrightarrow{E_C}$. У цьому випадку результуюче поле $E(x)$ буде тільки збільшуватись в усіх точках приконтактної області. Очевидно, що невелике зовнішнє поле $E_0 < E_C$ принципово не змінює просторові розподіли електронів і перше рівняння системи (26) для потоку вільних електронів: $D^- \dfrac{\partial N}{\partial x} + \mu^- E(x) N(x) = \mu^- E_0 N_0$, з якого визначаємо залежність для поля:

$$E(x) = \frac{\mu^- E_0 N_0 - D^- \dfrac{\partial N}{\partial x}}{\mu^- N(x)} = \left[E_0 - \frac{D^-}{\mu^-}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{N}{N_0}\right)\right]\cdot\left[\frac{N_0}{N(x)}\right] = \\ = E_0 + E_1(x) \qquad (27)$$

Використовуючи для $N(x)$ залежність (16), можна графічно переконатись (рис. 10а), що залежність для поля $E_1(x) = E_1 \exp(-x/L_1)$ дає гарний наближений розв'язок. Більш строге доведення того, що функціональна залежність для концентрації вільних носіїв мало змінюється $(L_C \to L_1)$ при появі зовнішнього поля і змінна складова результуючого поля описується експонентою, можна одержати підстановкою в (26) розкладеної в ряд основної експоненти залежності (16):

$$N(x) = N_0 \exp\left\{C_0 \exp\left(-\frac{x}{L_1}\right)\right\} = \\ = N_0\left\{1 + C_1 \exp\left(-\frac{x}{L_1}\right) + \frac{C_2^2}{2!}\exp\left(-\frac{2x}{L_1}\right) + \frac{C_3^3}{3!}\exp\left(-\frac{3x}{L_1}\right) + \ldots\right\}$$

та поля у вигляді: $E(x) = E_0 + E_1 \exp(-x/L_1)$. В результаті підстановки одержуємо систему рівнянь для констант при різних експонентах:

$$\begin{cases} \dfrac{D^- C_1}{L_1} = \mu^- E_0 C_1 + \mu^- E_1 \\ \dfrac{D^- C_2^2}{L_1} = \mu^- E_0 \dfrac{C_2^2}{2} + \mu^- E_1 C_1 \\ \dfrac{D^- C_3^3}{2L_1} = \mu^- E_0 \dfrac{C_3^3}{6} + \mu^- E_1 \dfrac{C_2^2}{2} \\ \ldots \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_1 = \dfrac{\dfrac{\mu^-}{D^-} E_1 L_1}{1 - \dfrac{\mu^-}{D^-} E_0 L_1} = \dfrac{\dfrac{\mu^-}{D^-} E_1 L_1}{1 - \dfrac{\mu^-}{D^-} E_0 L_1} \\ C_2^2 = \dfrac{\dfrac{\mu^-}{D^-} E_1 L_1 C_1}{1 - \dfrac{\mu^-}{D^-}\dfrac{E_0 L_1}{2}} = \dfrac{\left(\dfrac{\mu^-}{D^-} E_1 L_1\right)^2}{\left(1 - \dfrac{\mu^-}{D^-} E_0 L_1\right)\left(1 - \dfrac{\mu^-}{D^-}\dfrac{E_0 L_1}{2}\right)} < \\ < \left(\dfrac{\dfrac{\mu^-}{D^-} E_1 L_1}{1 - \dfrac{\mu^-}{D^-} E_0 L_1}\right)^2 \\ C_3^3 = \dfrac{\dfrac{\mu^-}{D^-} E_1 L_1 C_2^2}{1 - \dfrac{\mu^-}{D^-}\dfrac{E_0 L_1}{3}} = \dfrac{\left(\dfrac{\mu^-}{D^-} E_1 L_1\right)^3}{\left(1 - \dfrac{\mu^-}{D^-} E_0 L_1\right)\left(1 - \dfrac{\mu^-}{D^-}\dfrac{E_0 L_1}{2}\right)\left(1 - \dfrac{\mu^-}{D^-}\dfrac{E_0 L_1}{3}\right)} < \\ < \left(\dfrac{\dfrac{\mu^-}{D^-} E_1 L_1}{1 - \dfrac{\mu^-}{D^-} E_0 L_1}\right)^3 \\ \ldots \end{cases} \qquad (28)$$

Порівняння цих коефіцієнтів показує, що поява зовнішнього поля E_0 дещо змінює співвідношення між коефіцієнтами за рахунок відмінностей в знаменниках, а отже і функціональну залежність для просторового розподілу вільних електронів. Фактично, спостерігається відносне зменшення внеску коротких компонент у функцію $N(x)$. Але цими змінами можна нехтувати, аж поки величина зовнішнього поля не стане більшою за E_C. Також при $E_0 \to 0$ маємо, що $E_1 \to E_C$ та $L_1 \to L_C$. А головне, маємо функціональні залежності для загального електричного поля у напівпровіднику та функціональну залежність для концентрації вільних носіїв. Далі необхідно переконатись, що ці залежності задовольняють інші рівняння системи (26) та визначити константи E_1 і L_1, і їх залежності від величини зовнішнього поля E_0.

Для просторового розподілу локалізованих електронів в приконтактній області можна скористатися співвідношенням (18), оскільки характер розподілу вільних електронів принципово не змінився. Необхідно тільки в (18), замінити L_C на L_1:

$$n_i(x) = n_{0i}\left[1 - \left(\frac{n_{Ci} - n_{0i}}{n_{0i}}\right)\exp\left(-\frac{x}{L_1}\right)\right] \qquad (29)$$

Відповідно і для напруженості поля, згідно рівняння Пуассона, буде залежність подібна до (14)

$$E_1 \exp\left(-\frac{x}{L_1}\right) = \frac{eL_1}{\varepsilon\varepsilon_0}(n_{Ci} - n_{0i})\exp\left(-\frac{x}{L_1}\right) \qquad (30)$$

З цього рівняння маємо перше співвідношення для знаходження констант E_1 і L_1:

$$\frac{E_1}{L_1} = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0}(n_{Ci} - n_{0i}) = \mathrm{Const}(E_0) \qquad (31)$$

Друге співвідношення для констант можна одержати з рівняння (27) при $x = 0$, оскільки воно повинно виконуватись для усіх координат зразка.

$$E_1 = E_C \frac{L_C}{L_1} - E_0\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right) \qquad (32)$$

Розв'язуючи систему двох рівнянь (31)–(32), одержуємо для E_1 та L_1:

$$\frac{E_1}{E_C} = \frac{L_1}{L_C} = \left[\sqrt{1 + \left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)^2} - \frac{E_0}{2E_C}\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)\right], \qquad (33)$$

Таким чином одержали просторові розподіли вільних $N(x)$ і локалізованих $n_i(x)$ електронів та просторовий розподіл напруженості електричного поля $E(x)$ у зразку при невеликих зовнішніх полях $(E_0 < E_C)$.

Подальше зростання зовнішнього поля буде ще більше змінювати функціональну залежність $N(x)$. Легко одержати асимптотичний вираз для $N_{as1}(x)$, до якого буде поступово переходити просторовий розподіл вільних носіїв при збільшенні зовнішнього поля. Величина E_1, згідно (33), поступово зменшується, тобто настане момент коли $E_1 << E_0$ і E_1 можна знехтувати в першому рівнянні системи (26). В цьому випадку розв'язок для $N_{as1}(x)$ буде:

$$N_{as1}(x) = N_0 + (N_M - N_0)\exp\left(-\frac{x}{L_{as1}}\right), \text{ де } L_{as1} = \frac{kT}{eE_0} \qquad (34)$$

Це і є функція асимптоти для $N(x)$ і тому для великих електричних полів $(E_0 \sim E_C)$ можна використовувати цю залежність. Фактично, це означає, що при великих зовнішніх полях коефіцієнти (28) при коротких експонентах стають настільки малими у порівнянні з першою експонентою, що ними можна нехтувати. Підстановкою $N_{as1}(x)$ в (27) можна переконатись (рис. 10b), що змінну складову поля $E(x)$ можна апроксимувати експонентою. Вибрані значення полів на рис. 10b враховують те, що величина E_C збільшується при збільшенні eU_C/kT. Але вже при таких полях виконується умова $E_1 < 0{,}1E_0$. Таким чином, помітні зміни для $N(x)$ суттєво не змінюють функціональну залежність для $E_1(x)$, а отже і для $n_i(x)$, оскільки повинно виконуватись рівняння Пуассона.

Параметри E_1 і L_1 знаходимо аналогічно до (31)–(32) і маємо:

$$\frac{E_1}{E_C} = \frac{L_1}{L_C} = \left[\sqrt{Z_1 + \left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)^2} - \frac{E_0}{2E_C}\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)\right], \qquad (35)$$

$$Z_1 = \frac{kT}{eU_C}\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right) = \frac{kT}{eU_C}\left[1 - \exp\left(-\frac{eU_C}{kT}\right)\right]$$

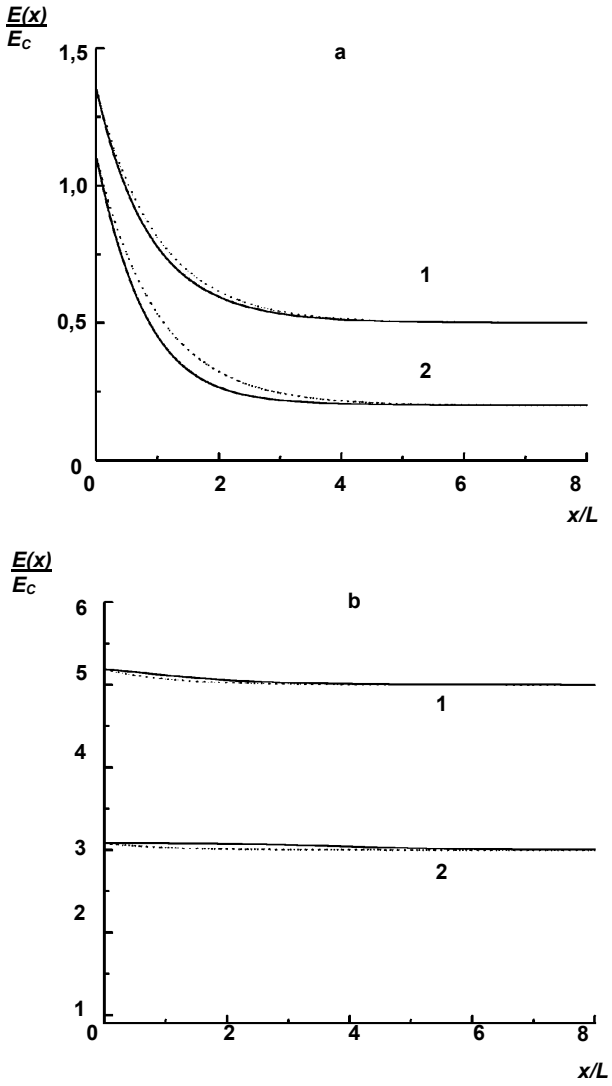

Рис.10. Розраховані просторові відносні залежності напруженості поля $E(x)/E_C$ по (27) (суцільні лінії) та їх апроксимація експонентою (пунктирні лінії) при $\vec{E_0} \uparrow\uparrow \vec{E_C}$ для невеликих полів (a): $E_0 = 0{,}5E_C$ для $\frac{eU_C}{kT} = 1$ (1) та $E_0 = 0.2E_C$ для $\frac{eU_C}{kT} = 4$ (2); та для значних полів (b): $E_0 = 5E_C$ для $\frac{eU_C}{kT} = 1$ (1) та $E_0 = 3E_C$ для $\frac{eU_C}{kT} = 4$ (2)

Ці залежності співпадають з (33), якщо під коренем замінити одиницю на константу Z. Ця безрозмірна константа змінюється в нашому випадку від 0,63 $(eU_C/kT = 1)$ до 0,25 $(eU_C/kT = 4)$ і її поява обумовлена відмінностями між співвідношенням похідної до функції $N(x)$ для подвійної експоненти і експоненти. Можна запропонувати два варіанта загальної об'єднаної формули для параметрів E_1 і L_1:

$$\frac{E_1}{E_C} = \frac{L_1}{L_C} = \left[\sqrt{\left(\frac{E_C + Z_1E_0}{E_C + E_0}\right) + \left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)^2} - \frac{E_0}{2E_C}\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)\right]$$

(36a)

$$\frac{E_1}{E_C}=\frac{L_1}{L_C}=$$
$$=\left[\sqrt{\left[1-(1-Z_1)\left(1-\exp\left(-\frac{E_0}{E_C}\right)\right)\right]+\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2}-\frac{E_0}{2E_C}\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)\right] \quad (36b)$$

в яких буде поступова зміна коефіцієнта під коренем від 1 до Z_1 при збільшенні зовнішнього поля. Фактично це означає, що для концентрації вільних електронів використовуємо формули:

$$N(x)=\left(\frac{E_C}{E_C+E_0}\right)N_0\exp\left[\frac{eU_C}{kT}\exp\left(-\frac{x}{L_1}\right)\right]+ +\left(\frac{E_0}{E_C+E_0}\right)\left[N_0+(N_M-N_0)\exp\left(-\frac{x}{L_1}\right)\right] \quad (37a)$$

$$N(x)=N_0\exp\left(-\frac{E_0}{E_C}\right)\exp\left[\frac{eU_C}{kT}\exp\left(-\frac{x}{L_1}\right)\right]+ +\left[1-\exp\left(-\frac{E_0}{E_C}\right)\right]\left[N_0+(N_M-N_0)\exp\left(-\frac{x}{L_1}\right)\right] \quad (37b)$$

Зовнішнє електричне поле E_0 дещо змінює функціональну залежність для вільних електронів, а функціональні залежності для локалізованих носіїв та приконтактного поля залишаються близькими до експоненційних. Основну зміну зовнішнє поле вносить в довжину екранування, яка для $\vec{E_0}\uparrow\uparrow\vec{E_C}$ помітно зменшується (36) завдяки зменшенню величини приконтактного заряду.

Привабливим є інший варіант знаходження наближених розв'язків системи рівнянь (26) при наявності зовнішнього поля, який полягає в тому, що вже відомо про зменшення E_1 і L_1 при зростанні E_0 і повинна відбуватися зміна функції просторового розподілу $N(x)$ при збереженні граничних умов. Ця функціональна зміна для $N(x)$ полягає у зменшенні внеску коротких компонент і збільшенні першої компоненти $\exp(-x/L_1)$. Така зміна для функції $N(x)=N_0\exp\left[\frac{eU_C}{kT}\exp\left(-\frac{x}{L_1}\right)\right]$ відбувається при зменшенні параметра $\frac{eU_C}{kT}$. Тому, функцію для $N(x)$ при наявності зовнішнього поля, шукаємо у вигляді:

$$N(x)=N_0\left\{1+\left[\frac{\exp\left(\frac{eU_C}{kT}\right)-1}{\exp\left(\frac{eU_C}{kT}\left(\frac{E_1}{E_C}\right)^{\alpha}\right)-1}\right]\left[\exp\left[\frac{eU_C}{kT}\left(\frac{E_1}{E_C}\right)^{\alpha}\exp\left(-\frac{x}{L_1}\right)\right]-1\right]\right\} \quad (38)$$

Ця функція задовольняє граничні умови (16), а показник α (трохи менший за 2) забезпечує зміну функції при зростанні зовнішнього поля. Залишається справедливим співвідношення (31) для E_1 і L_1, оскільки функціональна залежність для поля залишається експоненційною. З (27) для цього просторового розподілу при $x=0$ одержуємо трохи незручне рівняння для визначення E_1:

$$\frac{E_0}{E_C}=\frac{\left(\frac{E_1}{E_C}\right)^{\alpha-1}}{1-\exp\left[-\frac{eU_C}{kT}\left(\frac{E_1}{E_C}\right)^{\alpha}\right]}-\frac{\left(\frac{E_1}{E_C}\right)}{1-\exp\left(-\frac{eU_C}{kT}\right)}$$

та $\frac{L_1}{L_C}=\frac{E_1}{E_C}$ (39)

Легко підібрати показник степеня α і побачити, що при $\alpha=1{,}7$ просторова зміна поля дуже добре апроксимується експонентою.

Необхідно також розглянути ще один варіант функції для просторового розподілу вільних електронів (20). Зв'язок параметрів a_1 і b_1 залишається незмінним $\left(a_1=(1-b_1)\frac{N_M}{N_0}-1\right)$, оскільки зовнішнє поле не змінює граничні умови для концентрації вільних електронів. Для знаходження параметра b_1 необхідно рівняння для вільних носіїв системи (26) переписати у вигляді:

$$1=\frac{D^-}{\mu^-}\cdot\frac{1}{E_0N_0}\cdot\frac{\partial N(x)}{\partial x}+\left[1+\frac{E_1}{E_0}\exp\left(-\frac{x}{L_1}\right)\right]\frac{N(x)}{N_0}=Y_1(x) \quad (40)$$

Підбір параметра b_1 полягає в тому, щоб безрозмірна функція $Y_1(x)$ мінімально відрізнялася від одиниці. Але, у цю функцію входить значення E_1, яке можна визначити з (27) через параметри a_1 і b_1:

$$\frac{E_1}{E_C}=\sqrt{\frac{kT}{eU_C}\left(1+\frac{a_1}{2}\right)\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)+\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2\left(1+\frac{a_1}{2}\right)^2}- -\frac{E_0}{2E_C}\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)\left(1+\frac{a_1}{2}\right) \quad (41)$$

Одержані функції $Y_1(x)$ з мінімальним відхиленням від одиниці для різних значень eU_C/kT наведені на рис. 11. Видно, що при $E_0>2E_C$ відхилення $Y_1(x)$ не перевищує 1 % і тільки при малих зовнішніх полях відхилення досягає 4 %. Підібрана проста функція для $b_1(U_C,E_0)$:

$$b_1=\frac{2}{\left(1+\frac{2eU_C}{kT}\right)\left(\frac{kT}{2eU_C}+\frac{E_0}{E_C}\right)^2} \quad (42)$$

яка дає таке значення параметру, при якому спостерігається мінімальне відхилення від одиниці $Y_1(x)$, в широкому інтервалі значень зовнішніх полів до $E_0=20E_C$. Маємо, що цей параметр просторового розподілу вільних носіїв залежить від співвідношення N_M/N_0 і по квадратичній гіперболі зменшується від величини зовнішнього поля.

При подальшому збільшенні зовнішнього поля приконтактне поле E_1 стає настільки малим, що його взагалі можна нехтувати.

Таким чином, маємо два варіанта апроксимації функції для $N(x)$ при значних зовнішніх полях $(E_0>E_C)$ і необхідно визначити який з них кращий. Для цього спочатку порівняємо залежності $E_1(E_0)$, оскільки відомо, що при малих полях повинна бути залежність близька до (33), а при великих полях – асимптотично наближатись до (35).

На рис. 12 наведені залежності для E_1/E_C від величини зовнішнього поля. Як і очікувалось, ці криві лежать між функціями (33) та (35) і усі при зростанні E_0 асимптотично наближаються до гіперболи першого порядку.

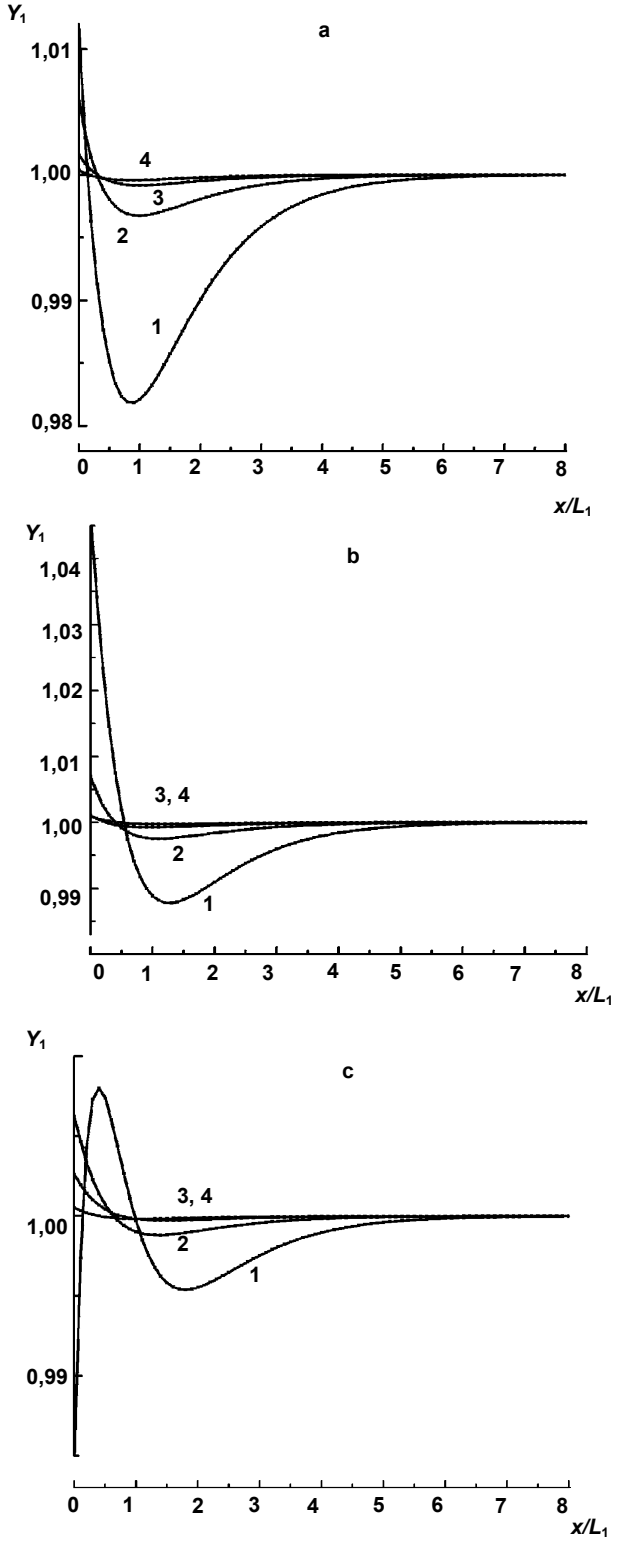

Рис. 11. Графіки функції $Y_1(x)$ для $\frac{eU_C}{kT}=1$ (a), $\frac{eU_C}{kT}=2$ (b) та $\frac{eU_C}{kT}=4$ (c) розраховані для різних величин зовнішнього поля: 1 – $E_0=2E_C$; 2 – $E_0=5E_C$; 3 – $E_0=10E_C$; 4 – $E_0=15E_C$

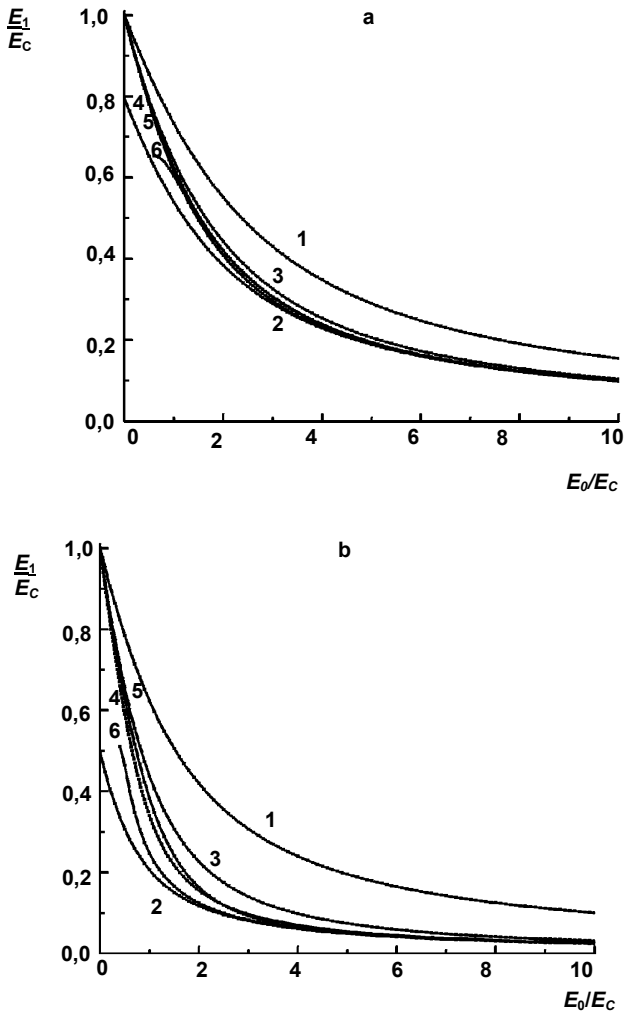

Рис. 12. Залежності E_1/E_C від величини зовнішнього поля E_0/E_C для $eU_C/kT=1$ (*a*) та $eU_C/kT=4$ (*b*) розраховані по різним залежностям: 1 – по (33); 2 – по (35); 3 – по (36a); 4 – по (36b); 5 – по (39); 6 – по (41)

Зазначимо, що збільшення параметра eU_C/kT (тобто, відношення концентрацій N_M/N_0) призводить до збільшення діапазону між (33) та асимптотою (35). Видно, що функції (36), (39) та (41) між собою досить близькі, що свідчить про те, що відповідні просторові розподіли $N(x)$ між собою також близькі. Тому критерієм фізично адекватного вибору просторового розподілу необхідно обирати близькість до експоненти приконтактного розподілу концентрацій локалізованих носіїв заряду $n_i(x)/\nu_i$. Для прикладу на рис. 13 наведені просторові розподіли локалізованих електронів для двох варіантів просторового розподілу вільних носіїв (38) та (20) при $E_0=5E_C$. При цьому порівняння залежностей для $N(x)$ показує, що вони відрізняються менше ніж на 0,5 % для $eU_C/kT=1$ та менше ніж на 6 % для $eU_C/kT=4$. Видно, що ситуація принципово не змінилася у порівнянні з $E_0=0$ (див. рис. 7a,c). Слід зазначити, якщо підставити одержані просторові розподіли $n_i(x)$ навіть для $eU_C/kT=4$ в рівняння Пуассона і проінтегрувати, то одержана функціональна залежність

для приконтактного поля не сильно відрізняється від експоненти. Якщо ще враховувати, що величина поля E_1 стрімко зменшується з появою зовнішнього поля E_0, то апроксимація просторового розподілу вільних носіїв (20) є цілком задовільненою.

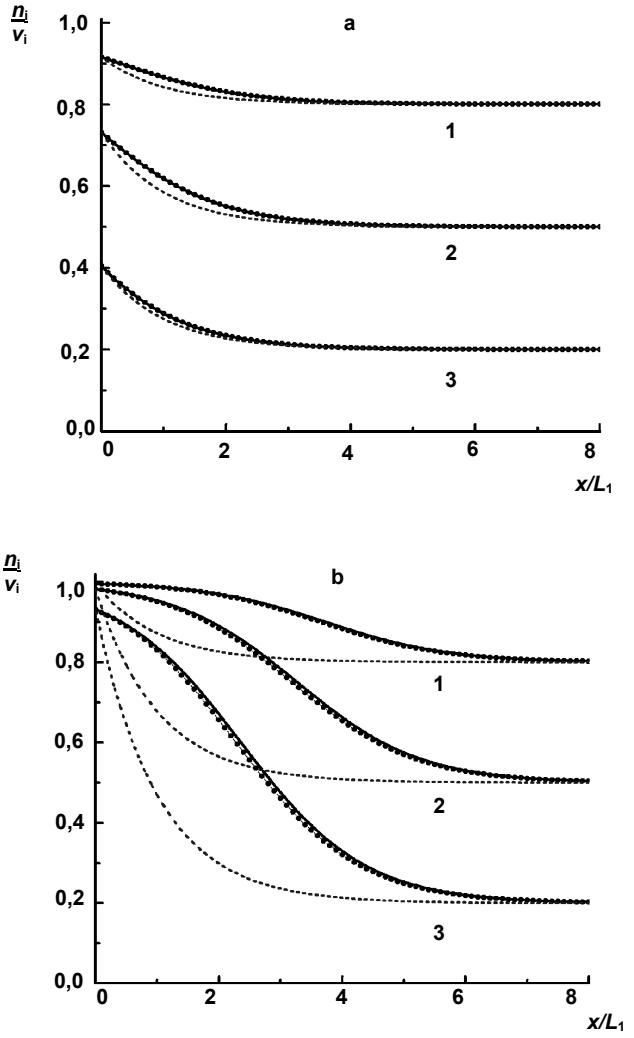

Рис. 13. Розраховані просторові залежності локалізованих електронів $n_i(x)/\nu_i$ для $eU_C/kT = 1$ (*a*) та $eU_C/kT = 4$ (*b*) при $N(x)$ по (38) (суцільні лінії), по (20) (точки) та їх апроксимації експонентою (пунктирні лінії) для $E_0 = 5E_C$ при різних рівнях заповнення пасток: $c = 0{,}8$ (1); $c = 0{,}5$ (2); $c = 0{,}2$ (3)

Необхідно пам'ятати, що параметри матеріалу $(\mu^{\pm}, D^{\mp}, \varepsilon)$ і моделі напівпровідника (N, n_i, L_C, L_1) є макроскопічними параметрами в базовій системі кінетичних рівнянь (1). Вони залишаються справедливими доки величини ∂x і L_1 залишаються більшими за довжину вільного пробігу вільних носіїв заряду (ℓ_e, ℓ_h). Якщо під дією зовнішнього електричного поля довжина екранування L_1 стає співмірною або меншою за довжину вільного пробігу ℓ_e (розглядаємо напівпровідник *n*-типу), то при цьому принципово змінюється характер руху вільних електронів в приконтактній області – суттєво збільшується імовірність тунельних переходів крізь бар'єр. Легко переконатись, що, наприклад, для широкозонного спеціально нелегованого напівпровідника ZnSe при кімнатній температурі ℓ_e (~ 23 нм) залишається суттєво меншою за L_1 (~ 55 нм) навіть при великому зовнішньому полі $E_0 = 10$ kB/см. Така оцінка дозволяє використовувати макроскопічні параметри і систему кінетичних рівнянь (26).

Таким чином, маємо просторові розподіли вільних і локалізованих електронів та просторовий розподіл напруженості електричного поля однієї половини зразка. Для одержання цих розподілів для другої половини необхідно розглянути випадок протилежно направленого зовнішнього поля, оскільки маємо два однакових та симетричних контакта на зразку.

6. Вплив зовнішнього поля $(\vec{E_0} \uparrow\downarrow \vec{E_C})$ на концентрації електронів при $N_M > N_0$.

При такій направленості зовнішнього поля маємо цікаві особливості результуючого поля в приконтактній області. Невелике зовнішнє поле $(E_0 < E_C)$ не змінить напрямку результуючого поля при $x = 0$, а всередині зразка – поле буде мати протилежний напрямок. З'явиться координата перерізу де поле буде дорівнювати нулю. В цій приконтактній області від 0 до x_0 суттєвого значення набуває дифузійний рух вільних електронів. Тому спочатку уважно подивимось на тенденції змін концентрацій вільних і локалізованих носіїв при невеликому зовнішньому полі. Граничні умови для концентрацій вільних електронів не змінюються. Очевидно, що в цьому випадку при $|E_0| < E_C$ рівняння для вільних електронів (26) набуває такого вигляду:

$$D^{-}\frac{\partial N}{\partial x} + \mu^{-}E(x)N(x) = -\mu^{-}E_0 N_0 , \qquad (43)$$

а величину поля також будемо апроксимувати експонентою:

$$E(x) = \frac{-E_0 N_0 - \frac{D^{-}}{\mu^{-}}\frac{\partial N}{\partial x}}{N(x)} = \\ = \left[-E_0 - \frac{D^{-}}{\mu^{-}}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{N}{N_0}\right)\right]\cdot\left[\frac{N_0}{N(x)}\right] = -E_0 + E_2(x) \qquad (44)$$

Також використовуючи для $N(x)$ залежність (17), можна графічно переконатись (рис. 14а), що залежність для поля $E_2(x) = E_2 \exp(-x/L_2)$ дає гарний наближений розв'язок.

Більш строге доведення того, що функціональна залежність для концентрації вільних носіїв мало змінюється $(L_C \to L_2)$ при появі невеликого зовнішнього поля і змінна складова результуючого поля описується експонентою, можна одержати підстановкою в (44) розкладеної в ряд основної експоненти залежності $N(x)$ та поля у вигляді: $E(x) = -E_0 + E_2 \exp\left(-\frac{x}{L_2}\right)$. В результаті підстановки одержуємо систему рівнянь для констант при експонентах:

$$\begin{cases} \dfrac{D^- C_1}{L_2} = -\mu^- E_0 C_1 + \mu^- E_2 \\ \dfrac{D^- C_2^2}{L_2} = -\mu^- E_0 \dfrac{C_2^2}{2} + \mu^- E_2 C_1 \\ \dfrac{D^- C_3^3}{2L_2} = -\mu^- E_0 \dfrac{C_3^3}{6} + \mu^- E_2 \dfrac{C_2^2}{2} \\ \ldots \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_1 = \dfrac{\dfrac{\mu^-}{D^-} E_2 L_2}{1 + \dfrac{\mu^-}{D^-} E_0 L_2} \\ C_2^2 = \dfrac{\dfrac{\mu^-}{D^-} E_2 L_2 C_1}{1 + \dfrac{\mu^-}{D^-} \dfrac{E_0 L_2}{2}} = \dfrac{\left(\dfrac{\mu^-}{D^-} E_2 L_2\right)^2}{\left(1 + \dfrac{\mu^-}{D^-} E_0 L_2\right)\left(1 + \dfrac{\mu^-}{D^-} \dfrac{E_0 L_2}{2}\right)} > \\ > \left(\dfrac{\dfrac{\mu^-}{D^-} E_2 L_2}{1 + \dfrac{\mu^-}{D^-} E_0 L_2}\right)^2 \\ C_3^3 = \dfrac{\dfrac{\mu^-}{D^-} E_2 L_2 C_2^2}{1 + \dfrac{\mu^-}{D^-} \dfrac{E_0 L_2}{3}} = \dfrac{\left(\dfrac{\mu^-}{D^-} E_2 L_2\right)^2}{\left(1 + \dfrac{\mu^-}{D^-} E_0 L_2\right)\left(1 + \dfrac{\mu^-}{D^-} \dfrac{E_0 L_2}{2}\right)\left(1 + \dfrac{\mu^-}{D^-} \dfrac{E_0 L_2}{3}\right)} > \\ > \left(\dfrac{\dfrac{\mu^-}{D^-} E_2 L_2}{1 + \dfrac{\mu^-}{D^-} E_0 L_2}\right)^3 \\ \ldots \end{cases} \tag{45}$$

Поява зовнішнього поля E_0 змінює співвідношення між коефіцієнтами на користь коротких компонент. Таким чином, поява зовнішнього поля змінює функціональну залежність для просторового розподілу вільних електронів. Але цими змінами можна нехтувати, аж поки величина зовнішнього поля залишається меншою за E_C. Також маємо, що при $E_0 \to 0$: $E_2 \to E_C$ та $L_2 \to L_C$. А головне, маємо функціональні залежності для загального електричного поля у напівпровіднику та функціональну залежність для концентрації вільних носіїв. Для просторового розподілу локалізованих електронів в приконтактній області можна скористатися співвідношенням (18), оскільки характер розподілу вільних електронів принципово не змінився, але необхідно замінити L_C на L_2:

$$n_i(x) = n_{0i}\left[1 - \frac{n_{0i} - n_{Ci}}{n_{0i}} \exp\left(-\frac{x}{L_2}\right)\right] \tag{46}$$

Відповідно, для напруженості поля з рівняння Пуассона маємо:

$$E_2 \exp\left(-\frac{x}{L_2}\right) = \frac{eL_2}{\varepsilon\varepsilon_0}(n_{0i} - n_{Ci}) \exp\left(-\frac{x}{L_2}\right) \tag{47}$$

Також одержуємо два рівняння для знаходження констант E_2 і L_2:

$$\frac{E_2}{L_2} = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0}(n_{0i} - n_{Ci}) \quad \text{та} \quad E_2 = E_C \frac{L_C}{L_2} + E_0\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right).$$

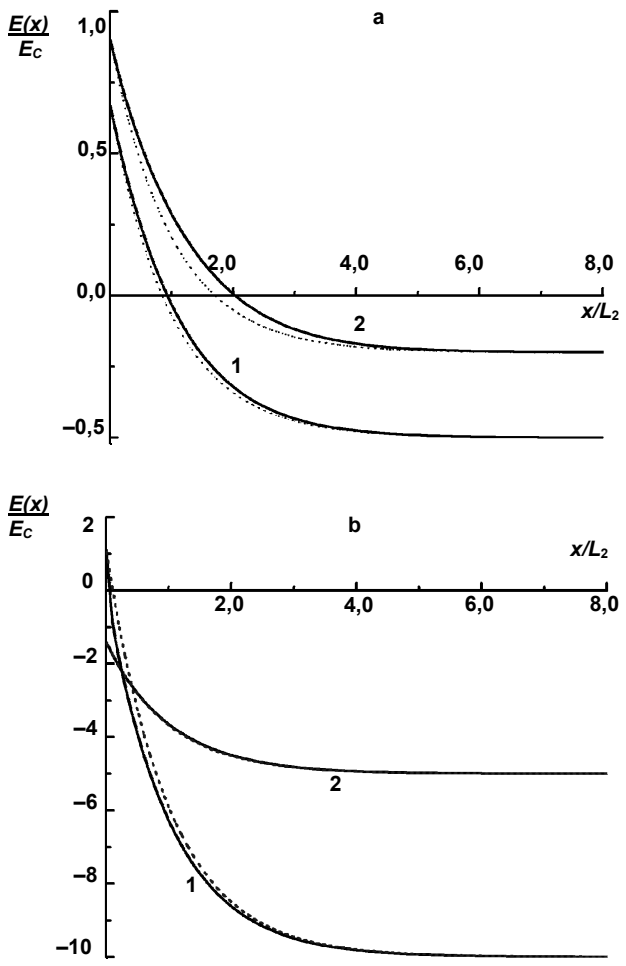

Рис. 14. Розраховані просторові відносні залежності напруженості поля $E(x)/E_C$ (суцільні лінії) по (44) при зовнішніх полях $\overrightarrow{E_0} \uparrow\downarrow \overrightarrow{E_C}$ та їх апроксимація експонентою (пунктирні лінії) при невеликих полях (a): $E_0 = 0{,}5E_C$ для $eU_C/kT = 1$ (1*a*) та $E_0 = 0{,}2E_C$ для $eU_C/kT = 4$ (2*a*); та значних полях (b): $E_0 = 5E_C$ для $eU_C/kT = 1$ (1*b*) та $E_0 = 10E_C$ для $eU_C/kT = 4$ (2*b*)

Розв'язуючи систему цих двох рівнянь, одержуємо залежності параметрів E_2 і L_2 від поля:

$$\frac{E_2}{E_C} = \frac{L_2}{L_C} = \left[\sqrt{1 + \left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2 \left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)^2} + \frac{E_0}{2E_C}\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)\right], \tag{48}$$

Ці залежності принципово схожі з (33), але в цьому випадку маємо не різницю, а суму тих же доданків. Отже, для випадку протилежних напрямків приконтактного і зовнішнього полів маємо тенденцію до збільшення параметрів E_2 і L_2 від зовнішнього поля. Для великих зовнішніх полів, згідно (45), ця тенденція буде наближатися до лінійної залежності для $E_2(E_0)$ і $L_2(E_0)$. Фактично, ці лінійні залежності $E_2 \approx E_0\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)$ та $L_2 \approx L_C \frac{E_0}{E_C}\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)$ і будуть асимптотами, аналогічними до гіперболи першого порядку (35), які одержали для $\overrightarrow{E_0} \uparrow\uparrow \overrightarrow{E_C}$. Можна оцінити величину зовнішнього поля (E_0^*) при якому результуюче поле на самому

контакті $(x=0)$ буде дорівнювати нулю. Оскільки при цьому $E_2 = E_0^*$, то з квадратичного рівняння для E_2 одержуємо: $E_0^* = E_C\sqrt{\frac{N_M}{N_0}}$. Тобто, для менших зовнішніх полів $(E_0 < E_0^*)$ результуюче електричне поле на контакті буде по величині менше за E_C але направлено вздовж $\overrightarrow{E_C}$, а при більших полях $(E_0 > E_0^*)$ – навпаки.

Для значних зовнішніх полів $(E_0 > E_C)$ пошук функції просторових розподілів вільних електронів у вигляді, аналогічному до (38):

$$N(x) = N_0\left\{1+\left[\frac{\exp\left(\frac{eU_C}{kT}\right)-1}{\exp\left(\frac{eU_C}{kT}\left(\frac{E_2}{E_C}\right)^{\alpha}\right)-1}\right]\left[\exp\left[\frac{eU_C}{kT}\left(\frac{E_2}{E_C}\right)^{\alpha}\exp\left(-\frac{x}{L_2}\right)\right]-1\right]\right\}$$

не дав задовільного результату, оскільки величина поля E_2 зростає при збільшенні зовнішнього поля E_0. Тому, будемо виходити з того, що поле в приконтактній області описується експонентою: $E_2\exp(-x/L_2)$ і задовольняє рівняння провідності (43). Тоді, відповідно до рівняння Пуассона, експонентою апроксимується і просторовий розподіл локалізованих електронів $n_i(x)$. Використовуючи зв'язок між локалізованими і вільними електронами (6) (розв'язок другого рівняння системи (26)), функцію просторових розподілів вільних електронів шукаємо по аналогії з (20) у вигляді функції з двома константами (a_2, b_2):

$$N(x) = N_0\cdot\frac{1+a_2\cdot\exp(-x/L_2)}{1-b_2\cdot\exp(-x/L_2)} \qquad (49)$$

Фактично можна зразу константу a_2 виразити через b_2, чи навпаки, використовуючи граничні значення концентрацій вільних електронів: $a_2 = (1-b_2)\frac{N_M}{N_0}-1 = (1-b_2)\cdot\exp\left(\frac{eU_C}{kT}\right)-1$, або $b_2 = 1-(1+a_2)\frac{N_0}{N_M} = 1-(1+a_2)\cdot\exp\left(-\frac{eU_C}{kT}\right)$. Така функція для $N(x)$ не є точним розв'язком рівняння провідності (43), а тому необхідно аналізувати функцію $Y_2(x)$ по її відхиленню від одиниці:

$$Y_2(x) = -\frac{D^-}{\mu^-}\frac{1}{E_0 N_0}\frac{\partial N}{\partial x} - \frac{E(x)N(x)}{E_0 N_0}, \qquad (50)$$

де $E(x) = -E_0 + E_2\exp\left(-\frac{x}{L_2}\right)$. Але, необхідно визначити величину E_2, яка повинна задовольняти це рівняння при $Y_2 = 1$. Підставляючи в (50) залежність (49) для $N(x)$, одержуємо квадратичне рівняння для E_2 з розв'язком (при усереднені функцій) у вигляді:

$$\frac{E_2}{E_C} = \frac{E_0}{2E_C}\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)\left(1+\frac{a_2}{2}\right) + \sqrt{\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2\left(1+\frac{a_2}{2}\right)^2 + \frac{kT}{eU_C}\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)\left(1+\frac{a_2}{2}\right)} \qquad (51)$$

Одержана залежність дуже схожа на (48) і дає практично ті ж величини E_2, особливо при малих значеннях a_2. В результаті можна проаналізувати відмінність $Y_2(x)$ від одиниці при різних eU_C/kT та E_0. В широкому діапазоні значень eU_C/kT і E_0 можна підібрати таке значення параметра a_2 чи b_2, що відмінність $Y_2(x)$ від одиниці не перевищує 1 % (рис. 15).

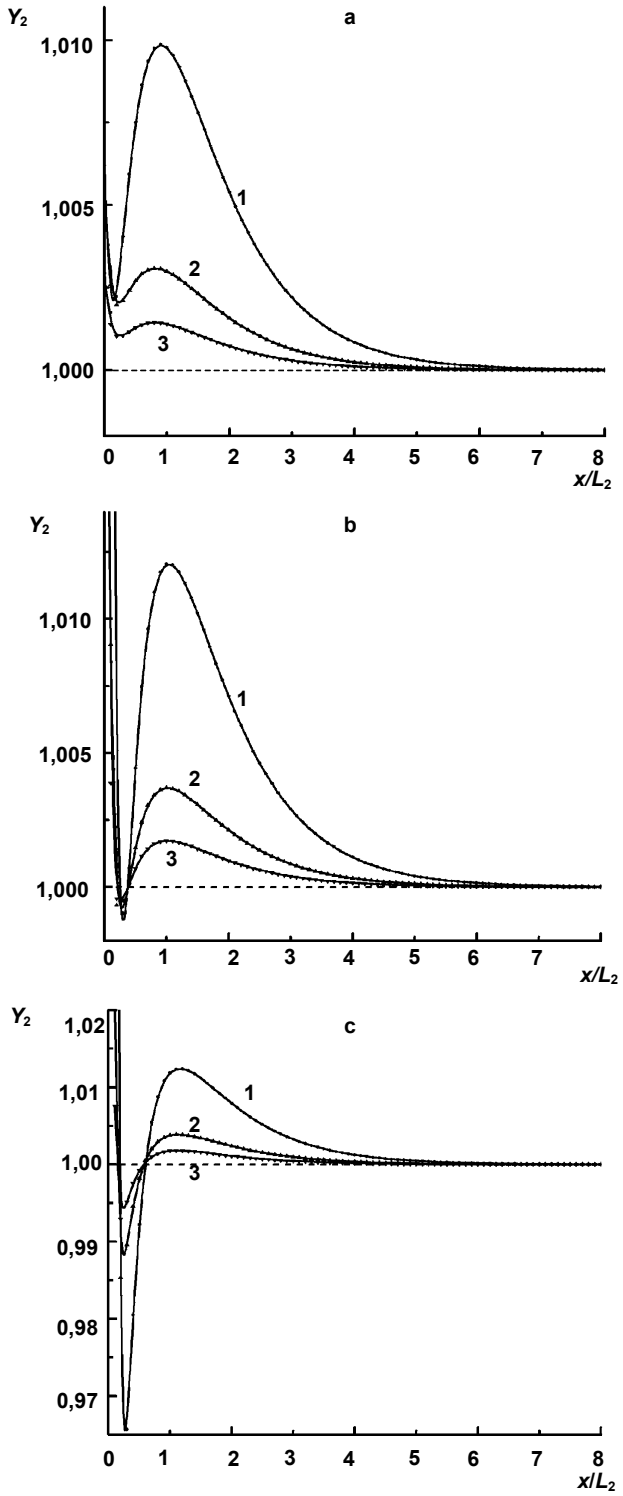

Рис. 15. Функція $Y_2(x)$ для $eU_C/kT = 1$ (*a*), $eU_C/kT = 2$ (*b*), $eU_C/kT = 4$ (*c*) при різних напруженостях зовнішнього поля: 1 – $E_0 = 5E_C$; 2 – $E_0 = 10E_C$ та 3 – $E_0 = 15E_C$

Це означає, що запропонована проста аналітична функція (49) дуже добре апроксимує точний розв'язок системи рівнянь (24). Звертає увагу незалежність підібраного параметра a_2 від eU_C/kT та його монотонне зменшення при збільшенні величини зовнішнього поля. Останнє відповідає очікуваним змінам форми просторового розподілу концентрації вільних електронів, згідно (45). Безрозмірний параметр a_2, при якому функція $Y_2(x)$ найменше відхиляється від одиниці дуже добре апроксимується підібраним рівнянням:

$$a_2 = \frac{5}{\left(1+\frac{E_0}{E_C}\right)^2} \qquad (52)$$

Наявність такої простої залежності дуже спрощує проведення розрахунків просторових розподілів вільних і локалізованих електронів та поля в приконтактній області.

Також слід відмітити, що для просторового розподілу локалізованих електронів $n_i(x)$ маємо дуже близьку до експоненціальної залежність. На рис. 16 наведені характерні розраховані залежності $n_i(x)/\nu_i$ (суцільні лінії) та їх апроксимація експонентами (пунктирні лінії).

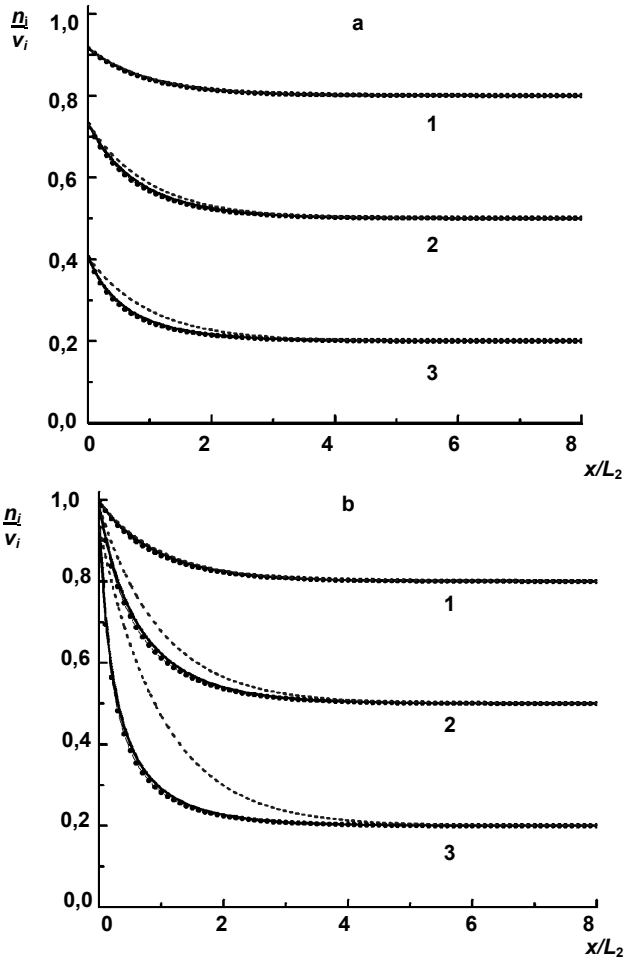

Рис. 16. Розраховані відносні просторові залежності локалізованих електронів $n_i(x)/\nu_i$ для $eU_C/kT = 1$ (*a*) та $eU_C/kT = 4$ (*b*) при зовнішньому полі $(\overrightarrow{E_0} \uparrow\downarrow \overrightarrow{E_C})$ величиною $E_0 = 5E_C$ (суцільні лінії), $E_0 = 15E_C$ (точки) та їх експоненційні апроксимації (пунктирні лінії) при різних рівнях заповнення пасток: $c = 0{,}8$ (1); $c = 0{,}5$ (2); $c = 0{,}2$ (3)

Слід відмітити, що просторові розподіли вільних електронів $N(x)$ при значних зовнішніх полях асимптотично наближаються до залежності:

$$N(x) = N_0 \Big/ \left[1 - \exp(-eU_C/kT)\cdot\exp(-x/L_2)\right] \qquad (53)$$

яка одержується з (49) при $a_2 \to 0$. В результаті і просторові розподіли локалізованих носіїв також будуть функціонально близькими, але будуть відрізнятися за рахунок L_2, яке зростає зі збільшенням зовнішнього поля.

Оскільки функція (49) добре апроксимує точний розв'язок системи рівнянь (26), то далі необхідно порівняти між собою одержані залежності для величини поля $E_2(E_0)$. На рис. 17 наведені розраховані по (48) і (51) залежності величини приконтактного поля E_2/E_C від величини зовнішнього поля E_0/E_C для випадку $\overrightarrow{E_0} \uparrow\downarrow \overrightarrow{E_C}$. Видно, що для великих значень ці залежності практично співпадають, а для невеликих полів залежність (51) непридатна. Тому, надалі можна використовувати тільки залежність (48) для визначення величини приконтактного поля.

Характерна довжина екранування локалізованими електронами в приконтактній області L_2 при великих напруженостях зовнішнього поля $(E_0 > E_C)$ буде визначатися співвідношенням: $L_2 = L_C \frac{E_2}{E_C}$, що є результатом виконання рівняння Пуассона, а E_2 визначається (48). Це означає, що довжина екранування збільшується при появі зовнішнього поля $(\overrightarrow{E_0} \uparrow\downarrow \overrightarrow{E_C})$ і рух вільних електронів залишається дифузійно-дрейфовим.

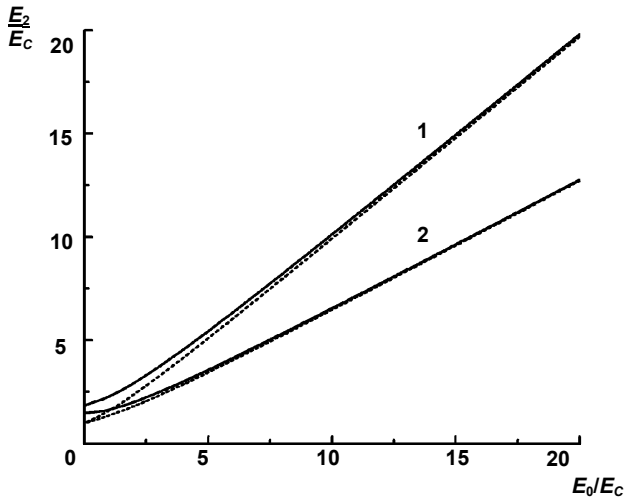

Рис. 17. Залежності величини приконтактного поля E_2/E_C від величини зовнішнього поля E_0/E_C $(\overrightarrow{E_0} \uparrow\downarrow \overrightarrow{E_C})$ для $eU_C/kT = 1$ (1) та $eU_C/kT = 4$ (2) розраховані по залежностям (51) (суцільні лінії) та (48) (пунктирні лінії)

Таким чином, маємо просторові розподіли вільних і локалізованих електронів та просторовий розподіл напруженості електричного поля і для другої половини зразка, коли концентрація електронів в металі перевищує концентрацію вільних електронів в напівпровіднику $(N_M < N_0)$.

7. Вплив зовнішнього електричного поля на концентрації електронів при $N_M < N_0$

При такому типі контактів $\left(eU_C/kT < 0\right)$ просторові розподіли вільних носіїв при $U_0 = 0$ описуються функцією (11) і експоненційною залежністю приконтактного поля, яке направлено в протилежному напрямку (з напівпровідника в метал). Очевидно, що прикладання зовнішнього поля буде змінювати і просторові розподіли вільних та локалізованих електронів, і характеристики приконтактного поля, але ці зміни повинні бути аналогічними до випадку контактів з $eU_C/kT > 0$. Тому необхідно це перевірити, використовуючи одержані результати для $eU_C/kT > 0$. Розглянемо один контакт $\left(x = 0\right)$ і два напрямки зовнішнього поля.

Система кінетичних рівнянь (26) залишається незмінною, але необхідно пам'ятати, що в металі присутній додатковий від'ємний, а в напівпровіднику – додатній заряд, що змінює напрямок E_C. В центральній частині напівпровідникового зразка заміна контактів з $N_M > N_0$ на $N_M < N_0$ не змінює концентрацію вільних N_0 та локалізованих n_{0i} носіїв і, відповідно, рівняння для густини струму (25) та виконання закону Ома, незалежно від напрямку зовнішнього поля.

Для приконтактної області будемо розглядати спочатку випадок невеликого зовнішнього поля $\left(E_0 < E_C\right)$, а потім, використовуючи отримані тенденції до змін концентрацій та поля, будемо розглядати великі зовнішні поля $\left(E_0 > E_C\right)$.

Для невеликих полів вважаємо, що просторові розподіли вільних електронів майже не змінюються:

$$N\left(x\right) = N_0 \exp\left[-\frac{eU_C}{kT}\cdot\exp\left(-\frac{x}{L_{3,4}}\right)\right] \qquad (54)$$

А величина приконтактного поля визначається з першого рівняння системи (26):

$$\overrightarrow{E_0}\uparrow\uparrow\overrightarrow{E_C}:\ \ E\left(x\right) = \left[-E_0 - \frac{D^-}{\mu^-}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{N}{N_0}\right)\right]\cdot\frac{N_0}{N} = -E_0 - E_3\exp\left(-\frac{x}{L_3}\right)$$

$$\overrightarrow{E_0}\uparrow\downarrow\overrightarrow{E_C}:\ \ E\left(x\right) = \left[E_0 - \frac{D^-}{\mu^-}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{N}{N_0}\right)\right]\cdot\frac{N_0}{N} = E_0 - E_4\exp\left(-\frac{x}{L_4}\right) \qquad (55)$$

Значення E_3 і E_4 визначаються з рівнянь (55) при підстановці в них (54) при $x = 0$:

$$\frac{E_3}{E_C} = \sqrt{1 + \left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M} - 1\right)^2} + \frac{E_0}{2E_C}\left(\frac{N_0}{N_M} - 1\right) \qquad (56)$$

$$\frac{E_4}{E_C} = \sqrt{1 + \left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M} - 1\right)^2} - \frac{E_0}{2E_C}\left(\frac{N_0}{N_M} - 1\right) \qquad (57)$$

Оскільки величина приконтактного поля змінюється експоненційно, то виконується рівняння Пуассона, з якого одержуємо величини довжини екранування:

$$\frac{E_3}{L_3} = \frac{E_4}{L_4} = \frac{E_C}{L_C} = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0}\left(n_{Ci} - n_{0i}\right) \qquad (58)$$

На рис. 18а та рис.19а наведені характерні результати розрахунків для $E\left(x\right)$ для $\overrightarrow{E_0}\uparrow\uparrow\overrightarrow{E_C}$ та $\overrightarrow{E_0}\uparrow\downarrow\overrightarrow{E_C}$, відповідно. Маємо особливість поведінки величин приконтактних полів E_1, E_2, E_3 і E_4, які по різному змінюються від зовнішнього поля E_0 в залежності від його напрямку. Так, для $E_1\left(\overrightarrow{E_0}\uparrow\uparrow\overrightarrow{E_C}\right)$ та $E_3\left(\overrightarrow{E_0}\uparrow\uparrow\overrightarrow{E_C}\right)$ і для $E_2\left(\overrightarrow{E_0}\uparrow\downarrow\overrightarrow{E_C}\right)$ та $E_4\left(\overrightarrow{E_0}\uparrow\downarrow\overrightarrow{E_C}\right)$ маємо протилежні тенденції зміни в приконтактній області. З фізичної точки зору це можна пояснити наступним чином. Невелике зовнішнє поле $\Delta E_0\left(\overrightarrow{E_0}\uparrow\uparrow\overrightarrow{E_C}\right)$ буде для $x \approx 0$ зменшувати результуюче поле на величину $\Delta E_0\cdot\frac{N_0}{N_M}$, яке більше за величину ΔE_0, а при $x >> L_3$ – зменшувати на ΔE_0. В результаті їх різниця, тобто E_3, буде збільшуватись. Протилежний напрямок зовнішнього поля $\Delta E_0\left(\overrightarrow{E_0}\uparrow\downarrow\overrightarrow{E_C}\right)$ буде збільшувати результуюче поле при $x \approx 0$ на більшу величину $\Delta E_0\cdot\frac{N_0}{N_M} > \Delta E_0$, ніж при $x >> L_4$ – $\Delta E_0\cdot N_0$, і в результаті різниця між ними, тобто E_4, буде зменшуватись. Таким чином, різний характер зміни величини приконтактного поля обумовлений зміною співвідношення між концентраціями вільних електронів в металі і напівпровіднику.

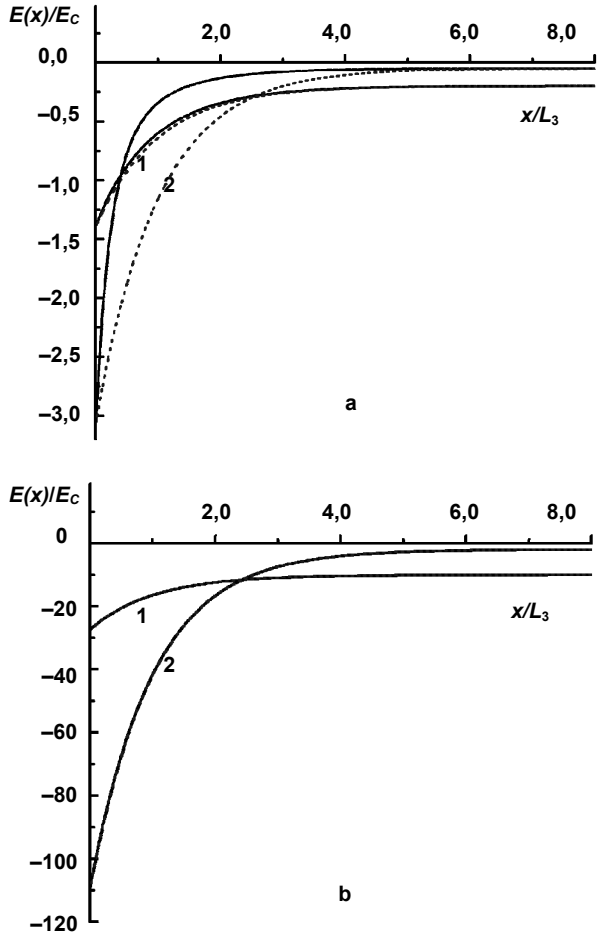

Рис. 18. Розраховані просторові відносні залежності напруженості поля $E\left(x\right)/E_C$ по (54) (суцільні лінії) та їх апроксимація експонентою (пунктирні лінії) при $\overrightarrow{E_0}\uparrow\uparrow\overrightarrow{E_C}$ для малих полів (a): $E_0 = 0{,}2E_C$ для $\frac{eU_C}{kT} = -1$ (1) та $E_0 = 0{,}05E_C$ для $\frac{eU_C}{kT} = -4$ (2); та для значних полів (b): $E_0 = 10E_C$ для $\frac{eU_C}{kT} = 1$ (1) та $E_0 = 2E_C$ для $\frac{eU_C}{kT} = 4$ (2)

Також слід зауважити, що в цьому випадку $(N_M < N_0)$ величини приконтактних полів E_3 та E_4 змінюються від E_0 значно швидше, на відміну від попереднього випадку $(N_M > N_0)$, що обумовлено наявністю множника $(N_0/N_M - 1)$. Це призводить до того, що діапазон малих зовнішніх полів суттєво зменшується до $E_0 < E_C/(N_0/N_M - 1)$, і це підтверджується розрахованими залежностями для $E(x)$, особливо для $eU_C/kT = -4$ (див. рис. 18а та рис. 19а).

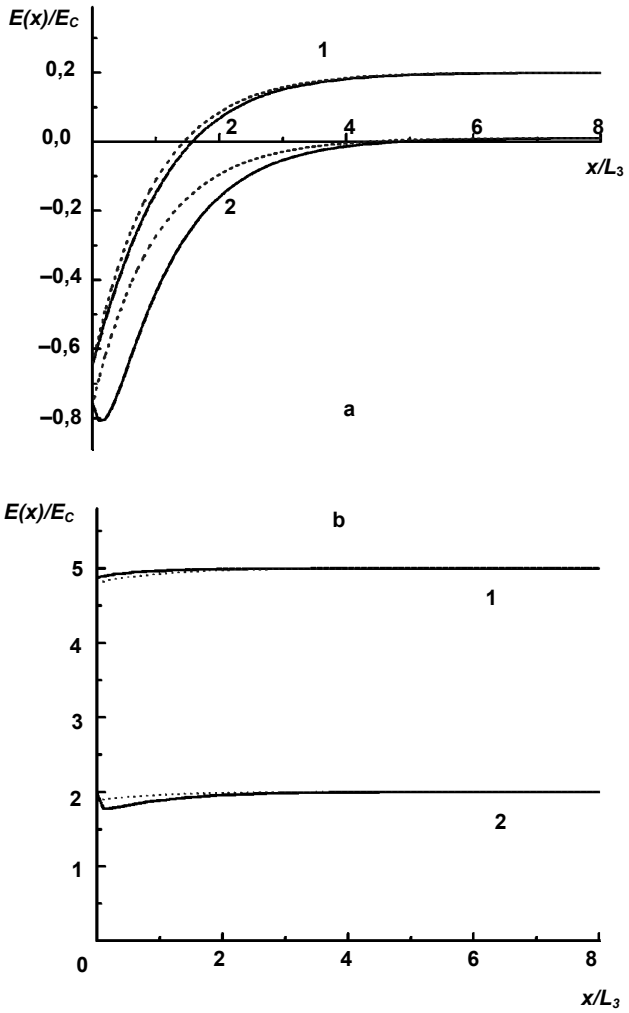

Рис. 19. Розраховані просторові відносні залежності напруженості поля $E(x)/E_C$ (суцільні лінії) по (54) при зовнішніх полях $\overrightarrow{E_0} \uparrow\downarrow \overrightarrow{E_C}$ та їх апроксимація експонентою (пунктирні лінії) при невеликих полях (a): $E_0 = 0{,}2E_C$ для $eU_C/kT = -1$ (1) та $E_0 = 0{,}01E_C$ для $eU_C/kT = -4$ (2); та значних полях (b): $E_0 = 5E_C$ для $eU_C/kT = 1$ (1) та $E_0 = 2E_C$ для $eU_C/kT = 4$ (2)

Для більших зовнішніх полів слід застосовувати іншу ніж (53) функцію для $N(x)$. Оскільки функція (53) є оберненою до функції (17), тому апроксимуючу функцію для $N(x)$ будемо брати обернену до (49) у вигляді:

$$N(x) = N_0 \frac{1 - b_3 \exp\left(-\frac{x}{L_3}\right)}{1 + a_3 \exp\left(-\frac{x}{L_3}\right)}$$

та

$$N(x) = N_0 \frac{1 - b_4 \exp\left(-\frac{x}{L_4}\right)}{1 + a_4 \exp\left(-\frac{x}{L_4}\right)} \qquad (59)$$

для $\overrightarrow{E_0} \uparrow\uparrow \overrightarrow{E_C}$ та $\overrightarrow{E_0} \uparrow\downarrow \overrightarrow{E_C}$, відповідно. З крайових умов маємо зв'язок між константами: $a_{3,4} = (1 - b_{3,4})\frac{N_0}{N_M} - 1$.

Для випадку $\overrightarrow{E_0} \uparrow\uparrow \overrightarrow{E_C}$, коли приконтактне поле E_3 зростає при збільшенні зовнішнього поля, по аналогії з попереднім випадком $(N_M > N_0)$, для E_3 будемо використовувати залежність (55) і проаналізуємо відхилення безрозмірної функції:

$$Y_3(x) = -\frac{D^-}{\mu^-}\frac{1}{E_0 N_0}\frac{\partial N}{\partial x} - \frac{E(x)N(x)}{E_0 N_0} =$$

$$= -\frac{kT}{eU_C}\frac{(a_3 + b_3)}{\left(\frac{E_0}{E_C}\right)\left(\frac{E_3}{E_C}\right)}\frac{\exp\left(-\frac{x}{L_3}\right)}{\left[1 + a_3 \exp\left(-\frac{x}{L_3}\right)\right]^2} + \qquad (60)$$

$$+\left[1 + \left(\frac{E_3}{E_C}\right)\left(\frac{E_C}{E_0}\right)\exp\left(-\frac{x}{L_3}\right)\right]\frac{1 - b_3 \exp\left(-\frac{x}{L_3}\right)}{1 + a_3 \exp\left(-\frac{x}{L_3}\right)}$$

від одиниці. З рис. 20a, b, c видно, що така функція для просторового розподілу вільних носіїв (59) та експоненційна залежність для приконтактного поля: $E(x) = -E_0 - E_3 \exp(-x/L_3)$; дуже добре (відхилення < 1 %) апроксимують розв'язок першого рівняння системи (26). Підбір параметра b_3 показав, що при збільшенні зовнішнього поля він спадає по гіперболі другого порядку і його величина також зменшується при збільшенні співвідношення N_0/N_M. Параметр b_3 можна описати такою підібраною функцією:

$$b_3 = \frac{\exp\left(-1{,}3 \cdot \frac{eU_C}{kT}\right)}{5}\left(\frac{E_C}{E_0}\right)^2 \qquad (61)$$

Така поведінка параметра b_3 вказує, що при збільшенні зовнішнього поля E_0 просторовий розподіл вільних електронів асимптотично наближається при $E_0 \to \infty$ до:

$$N_{as3}(x) = \frac{N_0}{1 + \left(\frac{N_0}{N_M} - 1\right)\exp\left(-\frac{x}{L_3}\right)}$$

Для значних зовнішніх полів, використовуючи просторові розподіли вільних носіїв (59), на рис. 18b наведені розраховані по (54) залежності для загального поля $E(x)$. Видно, що приконтактне поле дуже добре апроксимується експонентою.

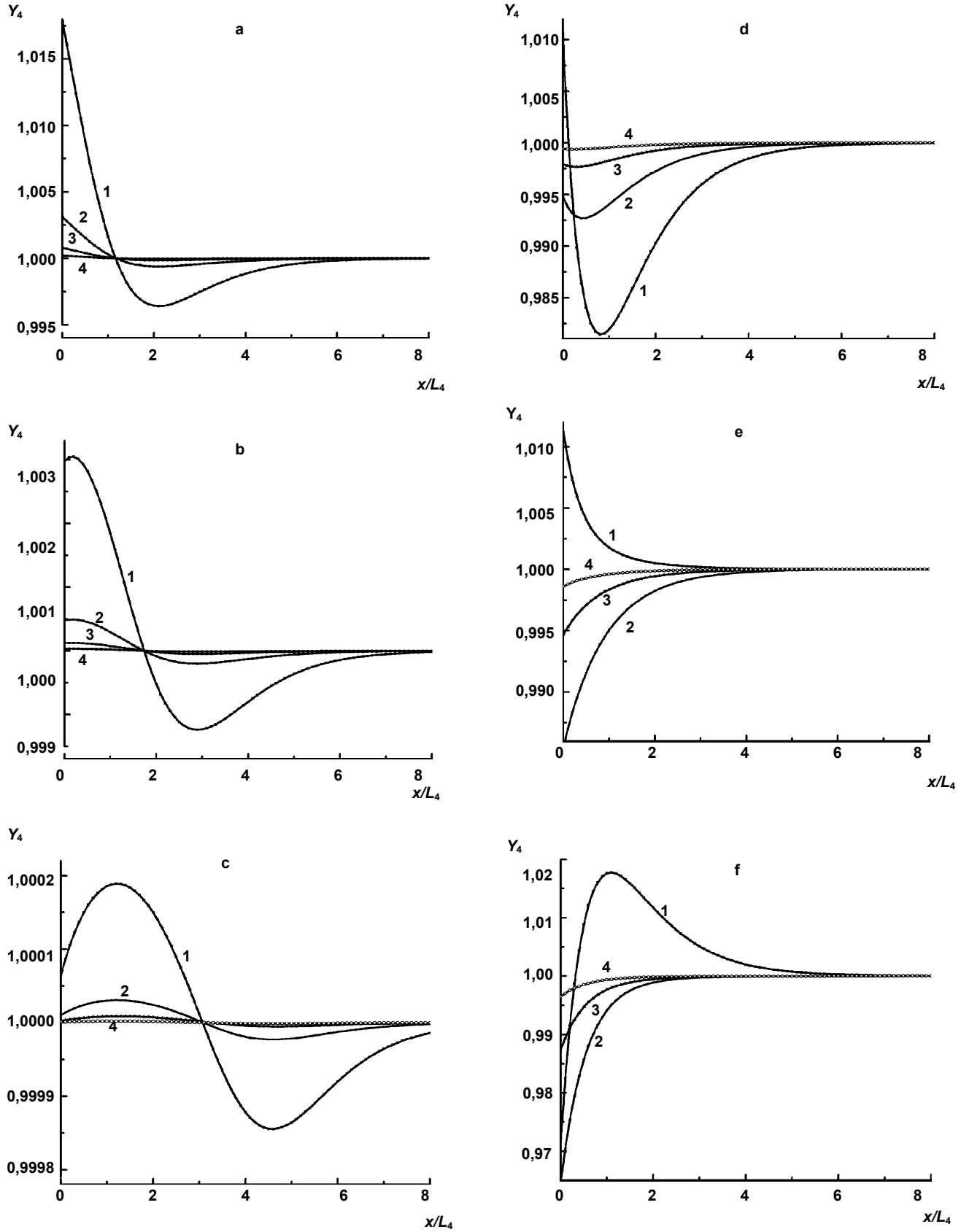

Рис. 20. Графіки функцій $Y_3(x)$ **(a, b, c) та** $Y_4(x)$ **(d, e, f) для** $\frac{eU_C}{kT}=1$ **(a, d),** $\frac{eU_C}{kT}=2$ **(b, e) та** $\frac{eU_C}{kT}=4$ **(c, f) розраховані для різних величин зовнішнього поля:**

1 – $E_0=2E_C$ **; 2 –** $E_0=5E_C$ **; 3 –** $E_0=10E_C$ **; 4 –** $E_0=20E_C$

Для протилежного напрямку зовнішнього поля можна ввести аналогічну безрозмірну функцію:

$$Y_4(x)=\frac{kT}{eU_C}\frac{(a_4+b_4)}{\left(\frac{E_0}{E_C}\right)\left(\frac{E_4}{E_C}\right)}\frac{\exp\left(-\frac{x}{L_4}\right)}{\left[1+a_4\exp\left(-\frac{x}{L_4}\right)\right]^2}+$$
$$+\left[1-\left(\frac{E_4}{E_C}\right)\left(\frac{E_C}{E_0}\right)\exp\left(-\frac{x}{L_4}\right)\right]\frac{1-b_4\exp\left(-\frac{x}{L_4}\right)}{1+a_4\exp\left(-\frac{x}{L_4}\right)} \quad (62)$$

і підбирати параметр b_4 чи a_4 таким чином, щоб відхилення функції $Y_4(x)$ від одиниці було мінімальним. Але спочатку необхідно визначити залежність $E_4(E_0)$, оскільки (57), судячи з попереднього випадку для $N_M > N_0$, дає тільки тенденцію до зміни $E_4(E_0)$ і адекватно не описує зменшення приконтактного поля при збільшенні зовнішнього поля. Тому, як і для E_1, знайдемо асимптотичний вираз для E_4. Для просторового розподілу вільних електронів одержуємо:

$$N_{as4}(x)=N_0-(N_0-N_M)\exp\left(-\frac{x}{L_{as4}}\right),\ \text{де}\ L_{as4}=\frac{kT}{eE_0} \quad (63)$$

який подібний до (34). Це також означає, що при використанні функції для вільних носіїв (59) повинно спостерігатися $a_4 \to 0$ при збільшенні зовнішнього поля.

Тоді, асимптотичний вираз для E_4 можна знайти з першого рівняння системи (26) при $E_0 >> E_4$ та $x=0$.

Одержуємо квадратичне рівняння:

$\left(\frac{E_4}{E_C}\right)^2+\left(\frac{E_4}{E_C}\right)\left(\frac{E_0}{E_C}\right)\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)-\frac{kT}{eU_C}\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)=0$, розв'язок якого буде:

$$\frac{E_4}{E_C}=\sqrt{Z_4+\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2}-\frac{E_0}{2E_C}\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right),$$

$$Z_4=\frac{kT}{eU_C}\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right) \quad (64)$$

Це рівняння майже повторює (35). Але, характерною особливістю цієї залежності є те, що асимптотичне значення для поля E_4 є більшим за (56), на відміну від випадку для $N_M > N_0$. Це обумовлено нехтуванням малого струму зумовленого малим доданком $E_4N(x)$ у порівнянні з N_0E_0, оскільки $E_4 < E_0$ і $N(x) < N_0$ в приконтактній області. За рахунок напрямку $\overrightarrow{E_C}$ у порівнянні з $\overrightarrow{E_0}$ для випадку $N_M > N_0$ цей малий доданок призводив до зменшення E_1, а для випадку $N_M < N_0$ – до збільшення E_4. Враховуючи неспівпадіння залежностей (56) та (64) можна застосувати аналогічний до (36) для E_1 вираз для E_4:

$$\frac{E_4}{E_C}=\frac{L_4}{L_C}=\left[\sqrt{\left(\frac{E_C+Z_4E_0}{E_C+E_0}\right)+\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2}-\frac{E_0}{2E_C}\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)\right] \quad (65a)$$

$$\frac{E_4}{E_C}=\frac{L_4}{L_C}=$$
$$=\left[\sqrt{\left[1+(Z_4-1)\left(1-\exp\left(-\frac{E_0}{E_C}\right)\right)\right]+\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2}-\frac{E_0}{2E_C}\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)\right] \quad (65b)$$

Відповідні залежності $E_4(E_0)$ наведені на рис. 21 де видно, що (65) добре забезпечує перехід $E_4(E_0)$ від малих зовнішніх полів (56) до асимптотичного значення (64) при великих полях.

Маючи залежність $E_4(E_0)$ можна аналізувати функцію $Y_4(x)$. На рис. 20d, e, f представлені графіки безрозмірної функції $Y_4(x)$. Видно, що така функція для просторового розподілу вільних носіїв (59) та експоненційна залежність для приконтактного поля: $E(x)=E_0-E_4\exp(-x/L_4)$; добре (відхилення Y_4 від одиниці практично не перевищує 1 %) апроксимують розв'язок першого рівняння системи (26). Перевірка також показала, що використання співвідношення (65b) для $E_4(E_0)$ дає помітно менше відхилення $Y_4(x)$ від одиниці, ніж (65a).

Підбір параметра a_4 показав, що при збільшенні зовнішнього поля він спадає по гіперболі другого порядку, як і для інших випадків (42), (52), (61). Параметр a_4 можна описати такою підібраною функцією:

$$a_4=\frac{2}{5}\frac{eU_C}{kT}\left(1+\frac{E_0}{E_C}\right)^{-2} \quad (66)$$

Як і передбачалося, така поведінка параметра a_4 вказує, що при збільшенні зовнішнього поля E_0 просторовий розподіл вільних електронів асимптотично наближається до експоненти (63). Для значних зовнішніх полів, використовуючи просторові розподіли вільних носіїв (59), на рис. 19b наведені розраховані по (54) залежності для загального поля $E(x)$. Видно, що приконтактне поле дуже добре апроксимується експонентою.

Залишилось переконатись, що при значних зовнішніх полях просторові розподіли локалізованих електронів $n_i(x)/\nu_i$ в приконтактній області не сильно відрізняються від експоненційних залежностей. На рис. 22 наведені характерні розраховані залежності $n_i(x)/\nu_i$ (суцільні лінії) та їх апроксимація експонентами (пунктирні лінії).

Таким чином, і для випадку $N_M < N_0$ маємо наближені розв'язки системи рівнянь (26) для просторових розподілів вільних і локалізованих електронів та загального розподілу електричного поля. Це дозволяє перейти до визначення вольт-амперних характеристик темнової провідності високоомних напівпровідників *n*–типу.

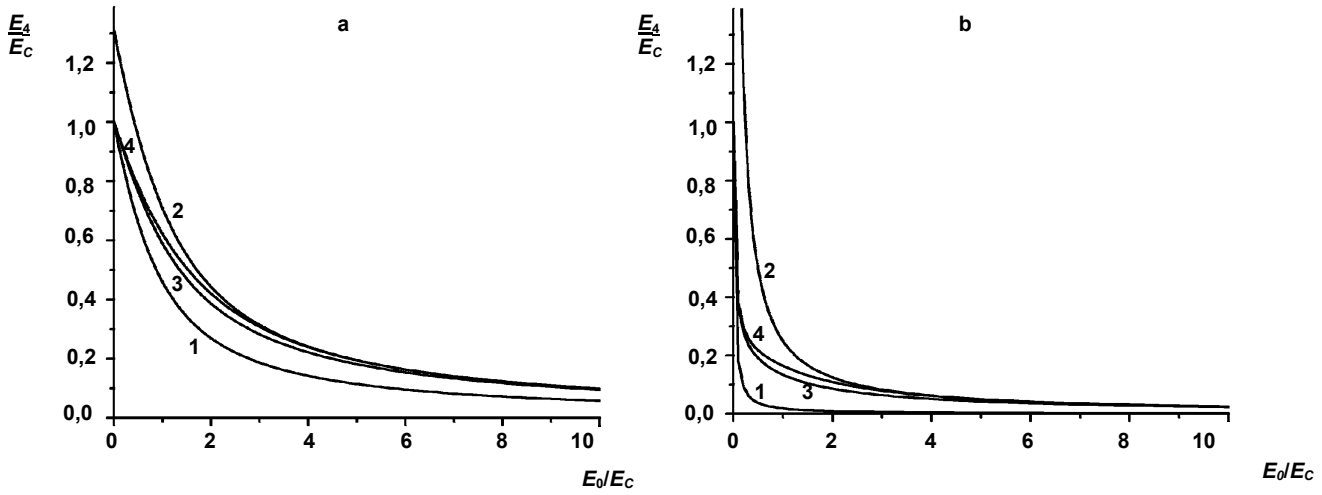

Рис. 21. Залежності E_4/E_C від величини зовнішнього поля E_0/E_C для $eU_C/kT=-1$ (a) та $eU_C/kT=-4$ (b) розраховані по різним залежностям: 1 – по (56); 2 – по (64); 3 – по (65a); 4 – по (65b)

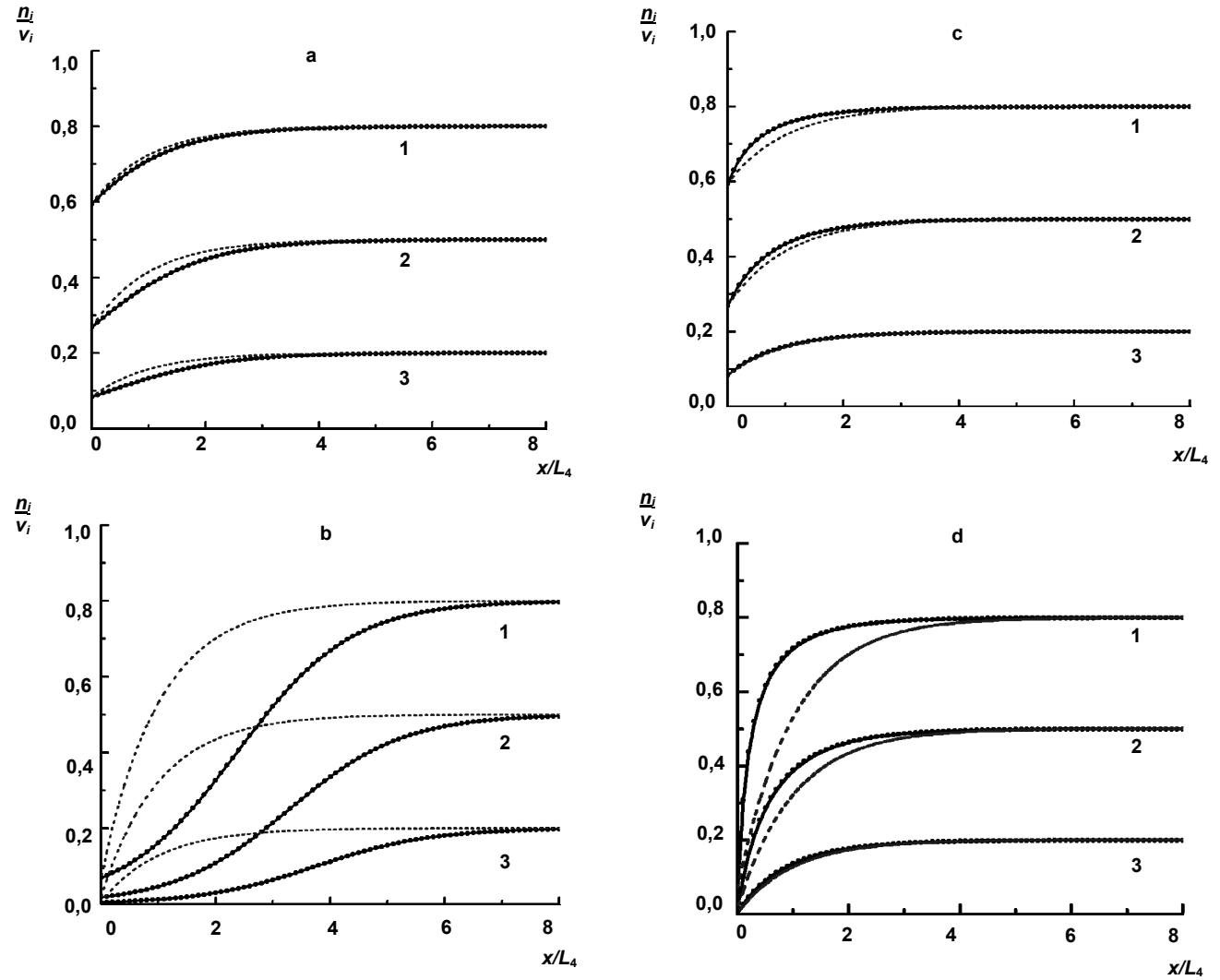

Рис. 22 Розраховані відносні просторові залежності локалізованих електронів $n_i(x)/\nu_i$ для $eU_C/kT=-1$ (a,c) та $eU_C/kT=-4$ (b,d) при $\vec{E_0}\uparrow\uparrow\vec{E_C}$ (a,b) та $\vec{E_0}\uparrow\downarrow\vec{E_C}$ (c,d) з величиною поля $E_0=5E_C$ (суцільні лінії), $E_0=15E_C$ (точки) та їх експоненційні апроксимації (пунктирні лінії) при різних рівнях заповнення пасток: $c=0,8$ (1); $c=0,5$ (2); $c=0,2$ (3)

8. ВАХ напівпровідника з омічними електричними контактами

До цього часу ми використовували величину поля E_0 не зв'язуючи її з прикладеною до напівпровідникового зразка різницею потенціалів U_0. Для випадку $N_M > N_0$ маємо такий просторовий розподіл величини поля у зразку:

$$E(x) = E_1 \exp\left(-\frac{x}{L_1}\right) + E_0 - E_2 \exp\left(-\frac{d-x}{L_2}\right) \qquad (67)$$

коли напрямок зовнішнього поля співпадає з віссю OX. Для протилежного напрямку поля рівняння (67) просто змінює знак, а функціонально не змінюється. Це обумовлено просторовою симетрією однакових електричних контактів. Аналогічно буде і для випадку $N_M < N_0$:

$$E(x) = -E_4 \exp\left(-\frac{x}{L_4}\right) + E_0 + E_3 \exp\left(-\frac{d-x}{L_3}\right) \qquad (68)$$

Різниця потенціалів на електричних контактах при $L_C, L_1, L_2, L_3, L_4 << d$ визначається:

$$U_0 = \int_0^d E(x)dx = E_0 d + E_1 L_1 - E_2 L_2 \qquad (69a)$$

$$U_0 = \int_0^d E(x)dx = E_0 d + E_3 L_3 - E_4 L_4 \qquad (69b)$$

Використовуючи для невеликих зовнішніх полів (початкова ділянка ВАХ) співвідношення (33) для $E_1(E_0)$, (48) для $E_2(E_0)$, (56) для $E_3(E_0)$ та (57) для $E_4(E_0)$ одержуємо:

$$U_0 = E_0 d\left[1 - \frac{L_C}{d}\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)\sqrt{4 + \left(\frac{E_0}{E_C}\right)^2\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)^2}\right] \qquad (70a)$$

$$U_0 = E_0 d\left[1 + \frac{L_C}{d}\left(\frac{N_0}{N_M} - 1\right)\sqrt{4 + \left(\frac{E_0}{E_C}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M} - 1\right)^2}\right] \qquad (70b)$$

Якщо розміри напівпровідникового зразка досягають ~1 см, а L_C по порядку величини становить декілька мікрон $(L_C << d)$, то фактично можна знехтувати маленьким доданком у скобках у порівнянні з одиницею, оскільки інші співмножники не сильно відрізняються від одиниці. Це означає, що при невеликих зовнішніх полях $E_0 < E_C$ буде виконуватись: $U_0 = E_0 d$. Можна визначити тенденції до зміни $E_0(U_0)$, використовуючи це наближення $\frac{E_0}{E_C} = \frac{U_0}{d}\frac{L_C}{E_C L_C} = \frac{U_0}{U_C}\frac{L_C}{d}$ і величина поля E_0 у зразку буде визначається:

$$E_0 = \frac{U_0}{d}\left[1 - \frac{L_C}{d}\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)\sqrt{4 + \left(\frac{U_0}{U_C}\right)^2\left(\frac{L_C}{d}\right)^2\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)^2}\right]^{-1} \qquad (71a)$$

$$E_0 = \frac{U_0}{d}\left[1 + \frac{L_C}{d}\left(\frac{N_0}{N_M} - 1\right)\sqrt{4 + \left(\frac{U_0}{U_C}\right)^2\left(\frac{L_C}{d}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M} - 1\right)^2}\right]^{-1} \qquad (71b)$$

Величина струму провідності визначається густиною струму (j), тобто потоком електронів $E_0 N_0$, який створюється полем E_0, і буде визначатися:

$$j(U_0) = e\mu^- N_0 E_0 = \frac{e\mu^- N_0 U_0}{d\left[1 - \frac{L_C}{d}\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)\sqrt{4 + \left(\frac{U_0}{U_C}\right)^2\left(\frac{L_C}{d}\right)^2\left(1 - \frac{N_0}{N_M}\right)^2}\right]} \qquad (72a)$$

$$j(U_0) = e\mu^- N_0 E_0 = \frac{e\mu^- N_0 U_0}{d\left[1 + \frac{L_C}{d}\left(\frac{N_0}{N_M} - 1\right)\sqrt{4 + \left(\frac{U_0}{U_C}\right)^2\left(\frac{L_C}{d}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M} - 1\right)^2}\right]} \qquad (72b)$$

Розраховані ВАХ для напівпровідника *n*-типу монокристалічного ZnSe з параметрами $d = 0{,}5$ см, $L_C = 3$ мкм (див. п. 3), $N_0 = 10^3$ см$^{-3}$, наведені на рис. 23 для різних eU_C/kT. Видно, що при $eU_C/kT > 0$ $(N_M > N_0)$ маємо надлінійні залежності ВАХ, але відхилення від закону Ома не перевищує 0,2 %. Таке відхилення практично не можна експериментально зареєструвати, оскільки воно значно менше за ефект Пула-Френкеля. А от для $eU_C/kT < 0$ $(N_M < N_0)$ спостерігається помітна сублінійна залежність ВАХ, причому її можна експериментально спостерігати вже при $eU_C/kT \le -2$ $(N_M \le N_0/10)$. Ця сублінійність обумовлена значним зростанням приконтактного поля $E_3(E_0)$, і, відповідно, падінням на ньому значного потенціалу, а математично це проявляється в наявності в (72b) множника $\left(\frac{N_M}{N_0} - 1\right) >> 1$.

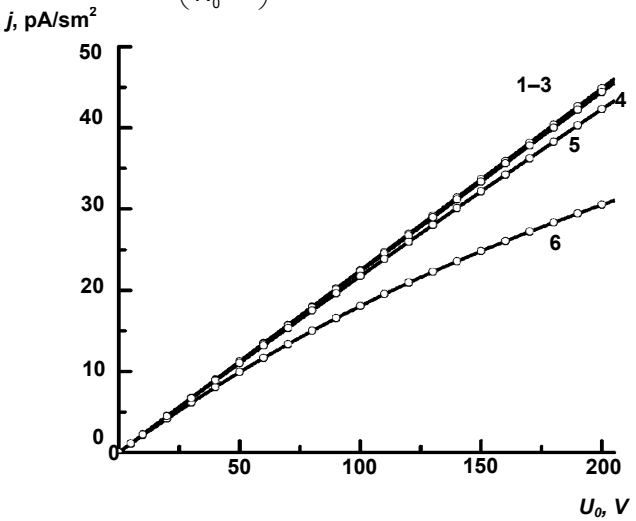

Рис. 23. Розраховані початкові ділянки ВАХ для високоомних напівпровідників ZnSe при кімнатній температурі:
1 – $eU_C/kT = +1$; **2 –** $eU_C/kT = +2$; **3 –** $eU_C/kT = +4$;
4 – $eU_C/kT = -1$; **5 –** $eU_C/kT = -2$; **6 –** $eU_C/kT = -4$

Таким чином, на початковій ділянці ВАХ маємо виконання закону Ома для високоомних напівпровідників сантиметрових розмірів з омічними контактами.

Подальше збільшення прикладеної до напівпровідникового зразка різниці потенціалів не змінює рівняння (67) та (68), залежності для $E_2(E_0)$ та $E_3(E_0)$ також не змінюються. Для $E_1(E_0)$ необхідно застосовувати співвідношення (36b), а для $E_4(E_0)$ – співвідношення (65b). Для випадку $N_M > N_0$ одержуємо дуже громіздке рівняння для визначення E_0:

$$U_0 = E_0 d\left[1-\frac{L_C}{d}\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)\sqrt{1+\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2}+\right.$$
$$+\sqrt{\left[1-(1-Z_1)\left(1-\exp\left(-\frac{E_0}{E_C}\right)\right)\right]+\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2}\Bigg)\times$$
$$\times\left(1+\sqrt{\frac{1}{4}+\frac{\left[1-(1-Z_1)\left(1-\exp\left(-\frac{E_0}{E_C}\right)\right)\right]}{\left(\frac{E_0}{E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2}}-\right. \tag{73}$$
$$\left.\left.-\sqrt{\frac{1}{4}+\frac{1}{\left(\frac{E_0}{E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2}}\right)\right]$$

Точний розв'язок цього рівняння відносно E_0 досить складний, оскільки E_0 входить під коренем і в показник експоненти. Тому порівняємо це рівняння з (70a). Перший множник в другому доданку в квадратних скобках не змінився $\frac{L_C}{d}\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)$; другий множник:

$$\left(\sqrt{1+\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2}+\right.$$
$$\left.+\sqrt{\left[1-(1-Z_1)\left(1-\exp\left(-\frac{E_0}{E_C}\right)\right)\right]+\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2}\right)<$$
$$<2\sqrt{1+\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2}$$

зменшився за рахунок того, що $Z_1<1$; а третій множник:

$$\left(1+\sqrt{\frac{1}{4}+\frac{\left[1-(1-Z_1)\left(1-\exp\left(-\frac{E_0}{E_C}\right)\right)\right]}{\left(\frac{E_0}{E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2}}-\sqrt{\frac{1}{4}+\frac{1}{\left(\frac{E_0}{E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2}}\right)$$

також трохи зменшився за рахунок Z_1. Таким чином, відхилення другого доданка від одиниці в квадратних скобках буде меншим ніж в (70a). Отже, при збільшенні зовнішнього поля відхилення від лінійної залежності $E_0(U_0)$ тільки ще зменшиться. Але перевірити це можна наступним чином. Можна розрахувати залежність $j(U_0)$ з рівнянь (73) та $j=e\mu^- N_0 E_0$, використовуючи E_0 як параметр. Перевірка показала, що дійсно до $E_0=5000$ В/см спостерігається дуже добре виконання закону Ома при $N_M \ge N_0$, навіть коли N_M перевищує N_0 на два порядки. І для повноти картини проаналізуємо ще асимптотичну залежність $E_0(U_0)$: $E_0\to\infty$, $E_1\to 0$, $E_2\to E_0(1-N_0/N_M)$:

$$U_0 = E_0 d - E_C L_C\left(\frac{E_0}{E_C}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2 \Rightarrow$$
$$E_0=\frac{U_0}{d\left[1-\frac{U_0}{U_C}\left(\frac{L_C}{d}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2\right]} \tag{74}$$

Маємо дуже мале відхилення $E_0(U_0)$ від пропорційної залежності за рахунок $\left(\frac{L_C}{d}\right)^2$. Відповідно, для густини струму маємо:

$$j(U_0)=\frac{e\mu^- N_0 U_0}{d\left[1-\frac{U_0}{U_C}\left(\frac{L_C}{d}\right)^2\left(1-\frac{N_0}{N_M}\right)^2\right]}\approx e\mu^- N_0\frac{U_0}{d}, \tag{75}$$

якщо $d>>L_C$.

Таким чином, для випадку $N_M \ge N_0$ маємо практично лінійну залежність густини струму від прикладеної напруги (відхилення не перевищує 0,5 %), тобто, в цьому випадку для високоомних напівпровідників добре виконується закон Ома.

Для випадку $N_M<N_0$ при великих зовнішніх полях $(E_0<E_C)$ також одержуємо дуже громіздке рівняння для визначення E_0:

$$U_0 = E_0 d\left[1+\frac{L_C}{d}\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)\left(\sqrt{1+\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2}+\right.\right.$$
$$\left.+\sqrt{\left[1+(Z_4-1)\left(1-\exp\left(-\frac{E_0}{E_C}\right)\right)\right]+\left(\frac{E_0}{2E_C}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2}\right)\times$$
$$\times\left(1-\sqrt{\frac{1}{4}+\frac{\left[1+(Z_4-1)\left(1-\exp\left(-\frac{E_0}{E_C}\right)\right)\right]}{\left(\frac{E_0}{E_C}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2}}+\right. \tag{76}$$
$$\left.\left.+\sqrt{\frac{1}{4}+\frac{1}{\left(\frac{E_0}{E_C}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2}}\right)\right]$$

яке принципово не відрізняється від (70b). За рахунок того, що $Z_4>1$, маємо зростання другого і третього множників для другого доданку в квадратних скобках у порівнянні з (70b). Це означає, що при збільшенні величини зовнішнього поля буде збільшуватись і сублінійність залежності $E_0(U_0)$. Також можна розрахувати залежність $j(U_0)$ з рівнянь (76) та $j=e\mu^- N_0 E_0$, використовуючи E_0 як параметр. На рис.24 наведені розраховані таким методом ВАХ при великих зовнішніх полях для того ж напівпровідника, що і на рис. 23.

Також можна одержати асимптотичну залежність $E_0(U_0)$ при $E_0\to\infty$: $E_4\to 0$, $E_3\to E_0\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)$; і одержуємо квадратичне рівняння: $U_0=E_0 d+E_C L_C\left(\frac{E_0}{E_C}\right)^2\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2$. Оскільки другий доданок стає співмірним з U_0 за рахунок множника $\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2$, то в цьому випадку необхідно розв'язувати це квадратичне рівняння відносно E_0:

$$E_0 = E_C\sqrt{\frac{U_0}{4U_C\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2}+\frac{d^2}{4L_c^2\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^4}}-\frac{E_C d}{2L_C\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2} \quad (77)$$

Відповідно, для густини струму при великих зовнішніх полях маємо:

$$j(U_0) = e\mu^- N_0 E_C\left[\sqrt{\frac{U_0}{4U_C\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2}+\frac{d^2}{4L_c^2\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^4}}-\frac{d}{2L_C\left(\frac{N_0}{N_M}-1\right)^2}\right] \quad (78)$$

На рис. 24 наведені розраховані по (72b), (76) та (78) залежності для густини струму. Видно, що для $eU_C/kT = -1$ $(N_M = 0{,}368\cdot N_0)$ маємо невелике відхилення від закону Ома і ці три залежності практично співпадають між собою аж до $E_0 = 5000$ В/см. Подальше збільшення співвідношення N_0/N_M призводить до суттєвого зменшення струму провідності і збільшується кривизна кривих ВАХ. При цьому вже не можна використовувати залежність (72b) для малих полів. В той же час залежності (76) та (78) дають практично однаковий результат (відхилення менше 1 %), що дозволяє застосовувати просту аналітичну залежність (78) для ВАХ при значних зовнішніх полях. Також слід зауважити, що криві ВАХ погано апроксимуються степеневими залежностями $j \sim U_0^{\alpha}$.

Таким чином, для випадку $N_M < N_0$ маємо суттєво нелінійну залежність густини струму від прикладеної напруги U_0, тобто, в цьому випадку для високоомних напівпровідників закон Ома не виконується. Характер експериментальних ВАХ високоомних напівпровідників дозволяє встановити співвідношення між N_M та N_0, тобто тип електричних контактів, які використовуються для досліджень.

Висновки

Одержана система розрахунків просторових розподілів вільних і локалізованих електронів, величини і напрямку приконтактного електричного поля і потенціалу для напівпровідників n–типу з контактною різницею потенціалів –0,1 В < U_C < 0,1 В. Система розрахунку базується на розв'язку системи кінетичних рівнянь, а не на розв'язку одного диференційного рівняння для потенціалу.

Для визначення інтегральних ВАХ напівпровідників з омічними контактами достатньо одержати стаціонарні розв'язки системи кінетичних рівнянь. Одержана більш коректна залежність для довжини екранування Дебая, яка враховує U_C і рівень заповнення глибоких пасток, які обумовлюють темнову провідність напівпровідників.

Зовнішнє електричне поле змінює величину приконтактного поля, причому у випадку його паралельності до приконтактного поля буде відбуватися зменшення U_C, а для протилежного напрямку поля – збільшення U_C. При наявності двох однакових електричних контактів ці зміни в приконтактних областях будуть частково компенсуватись для випадку малих полів. В результаті, початкова ділянка ВАХ буде лінійною.

При великих зовнішніх полях для $U_C > 0$ $(N_M > N_0)$ ВАХ високоомного напівпровідника буде несуттєво відрізнятися від лінійної залежності. А для $U_C < 0$ $(N_M < N_0)$ ВАХ стає сублінійною.

Таким чином, для високоомних напівпровідників *n*–типу з омічними контактами $(U_C \geq 0)$ виконується закон Ома. Для напівпровідників p–типу ситуація повинна бути аналогічною.

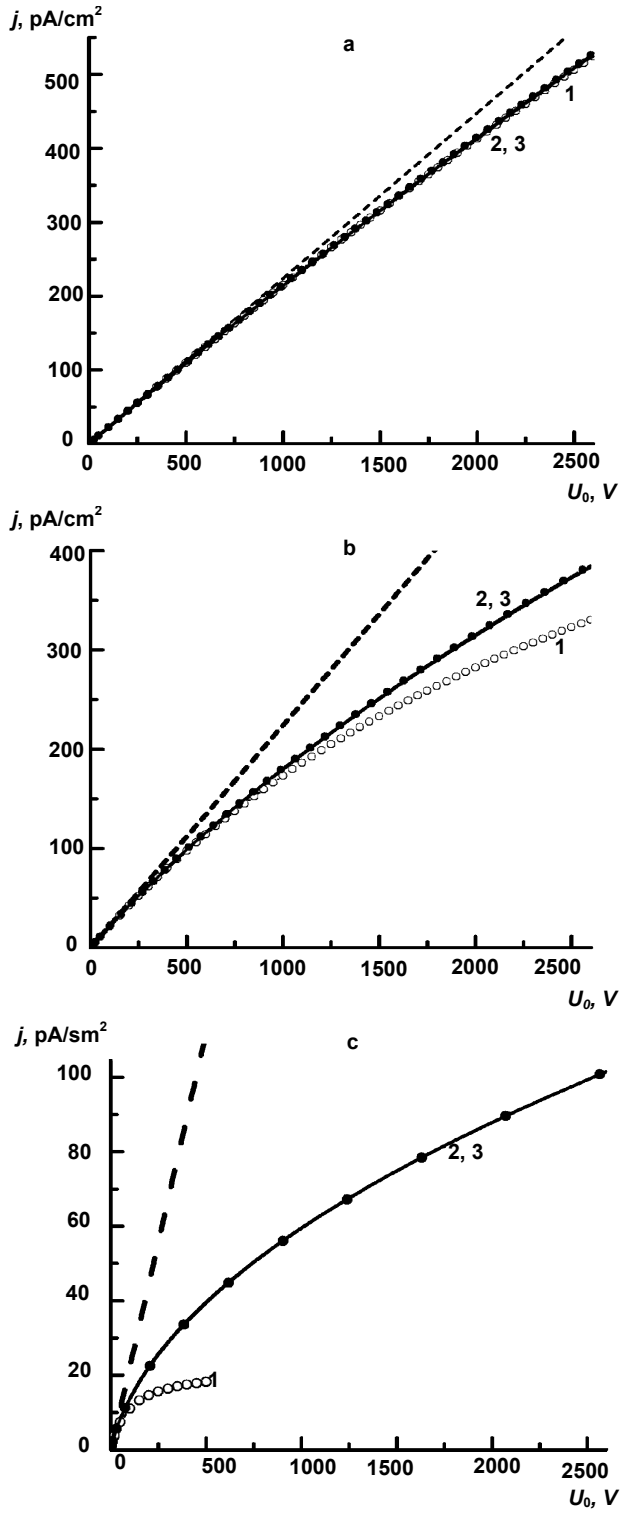

Рис. 24. Розраховані ВАХ для високоомних напівпровідників ZnSe ($d = 0{,}5$ см, $N_0 = 10^3$ см$^{-3}$) при кімнатній температурі для $eU_C/kT = -1$ (a); $eU_C/kT = -2$ (b); $eU_C/kT = -4$ (c) (по залежностям: (72b) – (1), по (76) – (2) точки, по (78) – (3) суцільна лінія. Пунктирна лінія – закон Ома $(j = e\mu^- N_0 U_0/d)$

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Родерик Э. Х.* Контакты металл – полупроводник / Э. Х. Родерик. – М.: Радио и связь. 1982.
2. *Бланк Т. В.* Механизмы протекания тока в омических контактах металл-полупроводник / Т. В. Бланк, Ю. А. Гольдберг // ФТП – 2007. – Т. 41. – С. 1281–1308.
3. *Пекар С. И.* Контакт полупроводника с металлом и приэлектродные скачки потенциала / С. И. Пекар // Изв. АН СССР, Сер. Физ., 1941. – V.5, № 4–5. – С. 422–433.
4. *Зюганов А. Н.* Инжекционно-контактные явления в полупроводниках / А. Н. Зюганов, С. В. Свєчников. – Киев: Наук. думка, 1981. – 256 с.
5. *Стриха В.И.* Теоретические основы работы контакта металл – полупроводник /. В.И. Стриха – Киев: Наук. думка, 1974. – 264 с.
6. *Lampert M.A., Mark P.* Current injection in solids. – New York; London : Acad. Press, 1970 / М.Ф. Ламперт, П. Марк / Инжекционные токи в твердых телах. – М.: Мир, 1973. – 416 с.
7. *Дегода В.Я.* Узагальнене кінетичне рівняння рекомбінаційної люмінесценції кристалофосфорів / В.Я. Дегода // Наукові записки Київського національного університету. – 2004. – Т. XI. – С. 255–261.
8. *Бьюб Р.* Фотопроводимость твердых тел / Р. Бьюб. – М.: Мир, 1962. – 558 с.
9. *Фок М.В.* Введение в кинетику люминесценции кристаллофосфоров / М.В. Фок. – М.: "Наука", 1964. – 284 с.
10. *Абакумов В.Н.* Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках / В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Яссиевич. – СПБ: "ПИЯФ РАН", 1977. – 375 с.
11. *Дегода В., Василенко Г.* Ефект пула-френкеля в кристалах селеніду цинку / В. Дегода, Г. Василенко // Вісник Київського національного університета ім. Т. Шевченка. Сер.: Фізика. – 2010. – Вип. 10–11.
12. *Бонч-Бруевич В.Л.* Физика полупроводников / В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. – 1977. – 672 с.
13. *Шалимова К.В.* Физика полупроводников / К.В Шалимова. – М.: " Энергия", 1971. – 312 с.

Надійшла до редколегії 12.06.14

В. Дегода, д-р физ.-мат. наук, ведущ. науч. сотр.,
В. Весна, канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр.,
Г. Подуст, асп.
КНУ имени Тараса Шевченко, Киев

ТЕМНОВАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ВЫСОКООМНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В роботе получена система расчетов пространственных распределений свободных и локализованых электронов, величины и направления приконтактного электрического поля и потенциалла для высокоомных полупроводников n–типа с контактной разницей потенциалов –0,1 В < U_C < 0,1 В. Система расчета базируется на решении системы кинетических уравнений, а не на решении одного дифференциального уравнения для потенциала. Для расчетов использовано простейшую модель полупроводника в котором есть тольки один тип глубоких ловушек с концентрацией v_i, которые частично заполнены локализованными электронами с мелких донороів. Індекс "i" означает, что потом можно будет ввести в расчеты другие мелкие незаполненые центры и более глубокие заполненные ловушки или центры; полупроводник сечением S и длиной d ~ 1 см имеет на концах электрические контакты. Ось OX направлена вздоль образца и перпендикулярна к контактам. Рассмотрены случаи, когда концентрации электронов ву металле на уровне зоны проводимости полупроводника N_M отличаются от концентрации свободных электронов в полупроводнике N_0: $N_M > N_0$, $N_M < N_0$ и случай, когда эти концентрации равны ($N_M = N_0$). Установлено, что несовпадение концентраций N_M і N_0 приводит к появлению значительного приконтактного электрического поля (сотни В/см), которое экспоненциально уменьшается в полупроводнике с растоянием от контакта.

Установлено, что внешнее электрическое поле изменяет величину приконтактного поля, причом в случае его параллельности к приконтактному полю будет происходить уменьшение U_C, а для противопожного направления поля – увеличение U_C. При наличии двух однаковых электрических контактов эти изменения в приконтактных областях будут частично компенсироваться для случая малых полей. В результате, начальный участок ВАХ будет линейным. При больших внешних полях для U_C >0 ВАХ высокоомного полупроводника будет несущественно отличатся от линейной зависимости. А для U_C <0 ВАХ становится сублинейной. Т.е., для высокоомных полупроводников с омическими контактами выполняется закон Ома.

Ключевые слова: темновая проводимость, высокоомный полупроводник, глубокие ловушки , приконтактное поле.

V. Degoda, Dr. Sci. (Phys.-math),
V. Vesna, Dr. Sci. (Phys.-math),
G. Podust, PhD
National Taras Shevchenko University of Kiev

THE DARK CONDUCTIVITY OF HIGH-RESISTANCE SEMICONDUCTORS

The work contains the calculation system of the spatial distribution of free and localized electrons, the magnitude and direction of near-contact electric field and the potential for high-resistivity n-type semiconductor with the contact potential difference of –0,1 В <U_C <0,1 V. The calculation system based on the solution of the system of kinetic equations rather than the differential equation for the potential. For the calculations used the simplest model of a semiconductor in which there is only one type of deep traps with concentration v_i, partially filled with electrons from shallow donors. Index "i" means that other empty centers and deeper filled traps or centers later can be add into the calculations. Semiconductor with section S and length d ~ 1 sm has at the electrical contacts the ends. OX axis is directed along the sample and perpendicular to the contacts. The cases are observed when the concentration of electrons in the metal at the conduction band of the semiconductor N_M differs from the concentration of free electrons in the semiconductor N_0: $N_M > N_0$, $N_M < N_0$ and these concentration levels coincide ($N_M = N_0$). Found that the discrepancy between the concentrations of N_M and N_0 leads to significant near-contact electric field (hundreds of V/sm) which decreases exponentially with distance from the semiconductor contact.

Found that an external electric field changes the value of the near-contact field, and if it is parallel to near-contact field U_C will be reduced, but for the opposite direction of the field there is increasing of U_C. If there are two identical electrical contacts these changes in near-contact areas will be partially compensated for the case of small fields. As a result, the initial region of current-voltage characteristic is linear. For the large external fields and U_C > 0 current-voltage characteristic of high-resistance semiconductor is slightly different from the linear dependence. And for U_C < 0 current-voltage characteristic is sublinear. That is, the Ohm's Law hplds for the high-resistance semiconductors with ohmic contacts.

Keywords: dark conductivity, near-contact, deep traps, high-resistance semiconductor.

УДК 531.8; 531.7; 681.2-2; 681.2-5

С. Сенчуров, канд. фіз.-мат. наук, доц.
КНУ імені Тараса Шевченка, Київ

АНАЛІЗ ЕФЕКТИВНОСТІ ЦИФРОВОЇ РЕНТГЕНІВСЬКОЇ ЛІНІЙНОЇ ТОМОГРАФІЇ

Проведений аналіз ефективності цифрової лінійної томографії в різних режимах роботи. Виміряна залежність відносного контрасту об'єкту від відстані до осі обертання.

Ключові слова: цифрова лінейна томографія.

В сучасній медицині для діагностики стану внутрішніх органів людини все ширше використовують комп'ютерні томографи. Сучасний комп'ютерний томограф дає змогу оперативно отримати тривимірні зрізи та зображення внутрішніх органів організму людини. Недоліком комп'ютерних томографів є високе дозове навантаження на пацієнта, що в десятки та сотні разів перевищує дозове навантаження окремого рентгенівського знімку [1].

Історично першим видом томографії була лінійна томографія, яку називають ще класичною томографією або ламінографією [2, 3]. Класичною томографією називають знімок тривимірного об'єкта, виконаний при взаємному переміщенні джерела випромінювання та касети з плівкою відносно спільної осі (рис. 1). При такому переміщенні зображення площини, яка проходить через вісь обертання паралельно площині приймача, виходить чітким, а зображення частин об'єкта, що лежать вище та нижче, розмазуються

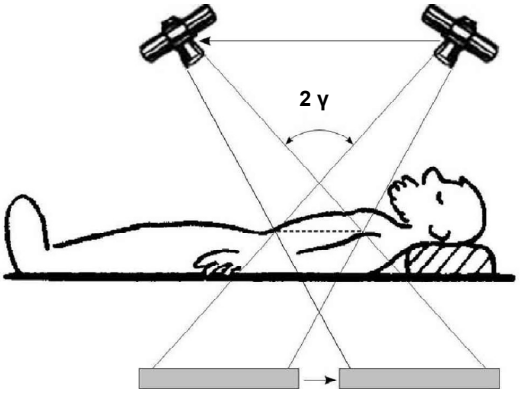

Рис. 1. Схема класичної томографії

Цифрова лінійна томографія виконується при реєстрації зображення цифровим приймачем у режимі інтегрування. Цифрова лінійна томографія, як і плівкова, дозволяє отримати чітке зображення одного перерізу. Перевагами використання цифрового приймача при лінійній томографії є:

- низька доза, еквівалентна одному рентгенівському знімку;
- відмова від плівки;
- розширення динамічного діапазону;
- можливість цифрової постобробки рентгенівського зображення.

Метою цієї роботи є вимірювання характеристик цифрової рентгенівської томографії.

Для вимірювання характеристик використаний спеціально виготовлений фантом, який складається з набору рентгенівських мір, прикріплених до пластин з оргскла (рис. 2, ліворуч). Розміри фантома Д х Ш х В становлять 100 х 100 х 35 мм.

Вимірювання проведені на цифровому рентгенівському лінійному томографі виробництва НВП "КВОМА" з цифровим рентгенівським приймачем виробництва НВО "Телеоптик".

Томограф може працювати при чотирьох кутах сканування γ: 40°, 30°, 20° та 8°, і при трьох різних швидкостях переміщення системи "трубка-приймач", які дають змогу отримати знімок на 40° за 2,1 с, 1,7 с та 1,3 с. Відстань від приймача до площини руху трубки становить 1,00 м. При збільшенні швидкості переміщення зростають вібрації системи, що призводить до додаткового розмиття зображення, тому всі імірювання, виконані в цій роботі, здійснювались при мінімальній швидкості переміщення. Анодний струм на трубці становив 20 мА, напруга становила 45 кВ для кутів 40° і 30°; 50 кВ для 20° та 60 кВ для 8°. Приклад зображення, отриманого в положенні, коли вісь обертання лежить в площині однієї з мір, наведений на рис. 3.

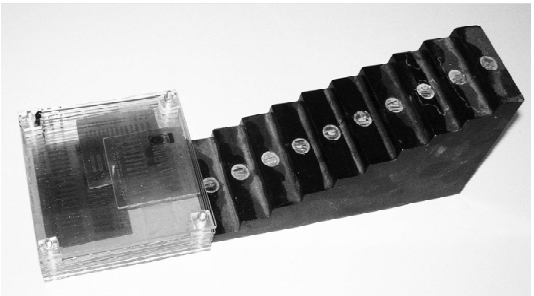

Рис. 2. Фантом для вимірювання параметрів цифрової лінійної томографії

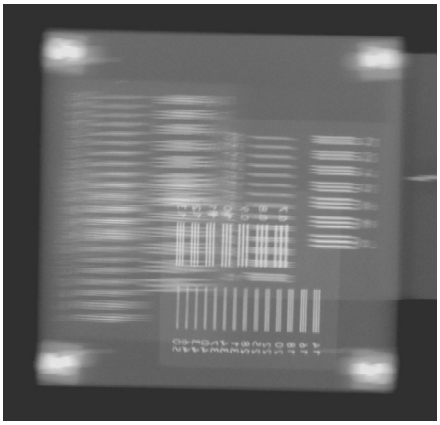

Рис. 3. Фрагмент знімка при куті сканування 40° та мінімальній швидкості переміщення

Для вимірювання характеристик цифрової лінійної томографії був отриманий набір знімків фантома в різних режимах роботи при різному положенні осі обертання відносно фантома. З отриманого набору було вирахувано зміну відносного контрасту об'єкта при переміщенні осі. Під контрастом розуміють величину $K = \frac{I_{об'єкт} - I_{фон}}{I_{фон}}$, де $I_{фон}$ – яскравість фону, $I_{об'єкт}$ – яскра-

© Сенчуров С., 2014

вість об'єкту, під відносним контрастом мається на увазі величина $K_{\text{відн}}(z) = \dfrac{K(z)}{K(0)}$ – відношення контрасту об'єкту на відстані z від осі до контрасту об'єкту, що лежить на осі обертання $z = 0$. Набір значень залежності відносного контрасту $K_{\text{відн}}(z)$ від відстані до осі обертання апроксимовувався лоренцевими піками (1) з параметрами амплітуди A, базового рівня y_0 та напівширини на половині висоти ω:

$$y(x) = y_0 + \frac{2A}{\pi}\frac{\omega}{4x^2 + \omega^2} \qquad (1)$$

Результати апроксимації наведені на рис. 4.

Як видно з рис. 4, падіння контрасту зображення в два рази — товщина умовного зрізу — становить для кута сканування 40°–6 мм, для кута сканування 30°–7 мм, для кута сканування 20°–10 мм та 20 мм для кута сканування 8°.

Роздільна здатність на осі обертання становить 2,0 пари ліній на мм і до 1,1 пари ліній на мм на відстані 3 мм до осі обертання.

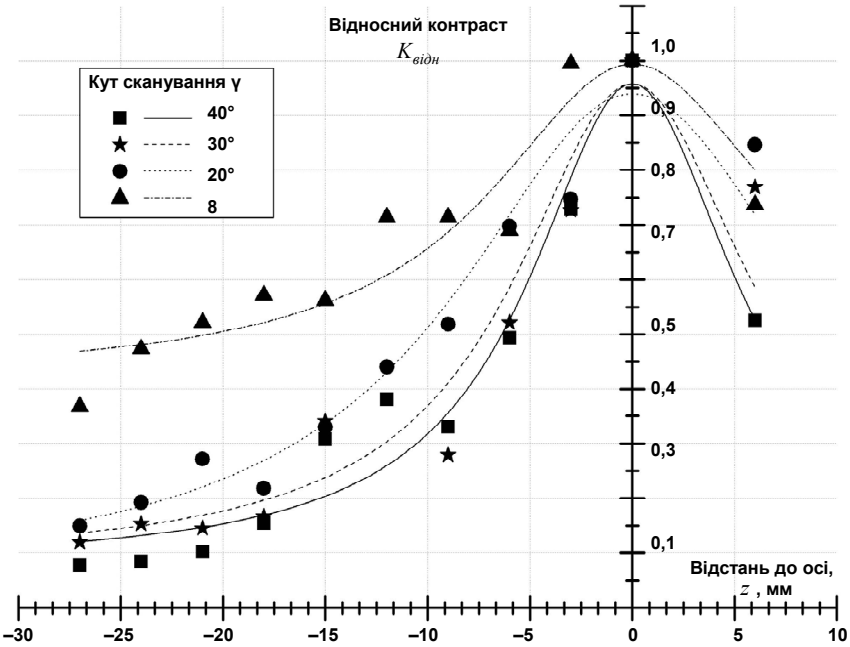

Рис. 4. Графік залежності відносного контрасту від відстані до осі обертання при різних кутах сканування

Висновки

1. Використання лінійної томографії з цифровим приймачем в режимі інтегрування зображення дозволяє отримати низькодозові перерізи з товщиною зрізу до 6,0 мм і роздільною здатністю до 2,0 пар ліній на мм, що в площині, паралельній до площини приймача, значно перевищує роздільну здатність аксіальних комп'ютерних томографів, а в напрямку, перпендикулярному до площини перерізу, поступається аксіальним комп'ютерним томографам.

2. Подальший розвиток цифрової лінійної томографії доцільно здійснювати шляхом переводу рентгенівського генератора і приймача в режим імпульсної рентгеноскопії і реалізації алгоритмів томосинтезу. Це дозволить при тому ж дозовому навантаженні отримати набір томографічних перерізів, паралельних до площини приймача.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Режим* доступу: http://ec.europa.eu/energy/nuclear/radioprotection /publication /doc/118_en.pdf.
2. *Dobbins III J.T.* Digital X-ray tomosynthesis: current state of the art and clinical potential / J.T. Dobbins III, D.J. Godfrey // Phys. Med. Biol. – 2003. – Vol. 48. – P. 65–106.
3. *Дьячкова С.Я.* Рентгеноконтрастные средства / С. Я. Дьячкова, В.А. Николаевский . – Воронеж., 2006.

Надійшла до редколегії: 12.10.13

С. Сенчуров, канд. физ.-мат. наук, доц.
КНУ имені Тараса Шевченко, Киев

АНАЛИЗ ЕФФЕКТИВНОСТИ ЦИФРОВОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ЛИНЕЙНОЙ ТОМОГРАФИИ

Проведен анализ эффективности цифровой линейной томографии в различных режимах работы. Измеряна зависимость относительного контраста объекта от расстояния до оси вращения.

Ключевые слова: цифровая линейная томография.

S. Senchurov, Dr. Sci. (Phys.-math), doc.
National Taras Shevchenko University of Kiev

THE ANALYSIS OF THE EFFICIENCY OF THE DIGITAL X-RAY LINEAR TOMOGRAPHY

The analysis of the efficiency of digital linear tomography in various operation modes was carried out. The dependence of the relative contrast on the distance to the fulcrum plane was measured.

Keywords: digital linear tomography.

УДК 535.33, 535.361, 530.182

В. Гаращенко, канд. фіз.-мат. наук,
Інститут надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України, Київ,
С. Зеленський, д-р фіз.-мат. наук, проф.,
О. Копишинський, канд. фіз.-мат. наук, доц.
КНУ імені Тараса Шевченка, Київ

ОПТИЧНЕ ОБМЕЖЕННЯ У СУСПЕНЗІЯХ ВУГЛЕЦЕВИХ МІКРОЧАСТИНОК НА ОСНОВІ ЕПОКСИДНОЇ СМОЛИ

В роботі досліджено ефект оптичного обмеження в епоксидних суспензіях вуглецевих мікрочастинок. Виявлено, що кінетика пропускання суспензії залежить як від її температури, так і від вмісту розчинника. Показано, що додавання до епоксидної суспензії розчинника покращує її обмежувальні властивості та робить таку суміш придатною для використання в якості оптичних обмежувачів.

Ключові слова: ефект оптичного обмеження, епоксидна суспензія, вуглецеві мікрочастинки.

Вступ. Серед широкого спектру процесів, що відбуваються при взаємодії лазерного випромінювання з мікрочастинками, важливе місце займають процеси, зумовлені лазерним нагріванням частинок. Потужне лазерне випромінювання здатне розігріти мікрочастинку до температури її випаровування. Розігріті в такий спосіб частинки починають світитися – виникає індуковане лазером теплове свічення (LII). Теплове свічення мікрочастинок реєструється як в газах, так і в конденсованих середовищах, зокрема в рідинах, прозорих полімерах та стеклах [1–5].

В конденсованому середовищі навколо розігрітої мікрочастинки відбуваються зміни оточуючого середовища, зумовлені піролізом. В більшості випадків продути піролізу зумовлюють збільшення екстинкції. При опроміненні реєструється самонаведене ослаблення лазерного випромінювання, так зване явище оптичного обмеження [6–8].

Явище оптичного обмеження знаходить своє практичне застосування у пристроях для захисту очей, фотоприймачів та інших приладів від руйнівного впливу потужного лазерного випромінювання. Крім того, можливе його застосування у нелінійно-оптичних пристроях для стабілізації енергії лазерних імпульсів, тощо.

Оптичне обмеження спостерігається у водних, хлороформових, етанолових, ізопропанолових суспензіях вуглецевих частинок [9,10], так само як і в суспензіях вуглецевих нанотрубок та фулеренів [11–13]. Суспензії вуглецевих частинок субмікронного розміру в прозорих полімерних середовищах високої в'язкості будуть предметом розгляду в даній роботі.

Методика експерименту. В якості матриці полімерної суспензії був використаний епоксидний діановий олігомер марки ЕД 20. Для приготування суспензії застосовано метод лазерної абляції. Фрагмент спектрально-чистого графіту занурювався в епоксидну матрицю та опромінювався послідовністю імпульсів YAG:Nd^{3+} лазеру (довжина хвилі 1064 нм, тривалість імпульсу 25 нс, густина потужності ~600 МВт/см^2). Внаслідок опромінення утворювалися частинки вуглецю з середнім розміром 130±20 нм. Концентрація частинок вуглецю в суспензії залежала від дози опромінення і контролювалася шляхом вимірювання пропускання суспензії при низькій інтенсивності лазерного випромінювання.

Джерелом потужного лазерного опромінення слугував YAG:Nd^{3+} лазер. Пропускання суспензії на довжині хвилі 1064 нм вимірювалося при двох рівнях густини потужності лазерного випромінювання: низькоінтенсивному (1,5 МВТ/см^2) та високоінтенсивному (60–90 МВт/см^2). Низькоінтенсивне випромінювання не впливає на оптичні властивості суспензії, тому і пропускання в цій області не залежить від дози опромінення. Високоінтенсивне випромінювання зумовлює зміну оптичних властивостей суспензії в залежності від інтенсивності та дози опромінення.

Релаксація індукованих лазером змін оптичного пропускання досліджувалась за методикою збуджуючого та скануючого лазерних променів. Проходження одиничного високоінтенсивного імпульсу неодимового лазеру (90 МВт/см^2) використовувалося для наведення оптичних змін в суспензії. Для реєстрації індукованих імпульсом накачки зміни оптичного пропускання зразку використовувався He-Ne лазер неперервної дії. Промені лазерів були протилежно направленими та перетиналися вздовж вузького треку всередині досліджуваного зразку. ФЕП із аналогово-цифровим перетворювачем детектували залежність інтенсивності пучка He-Ne лазера від часу.

Результати та обговорення. На рис. 1 представлено залежність пропускання вуглецевої суспензії в епоксидній смолі на довжині хвилі 1064 нм від дози опромінення (кількості лазерних імпульсів). Області I та II на рис. 1 відповідають низькоінтенсивному (1,5 МВт/см^2) та високоінтенсивному (60 МВт/см^2) лазерному опроміненню. Величину низькоінтенсивного пропускання було прийнято за одиницю.

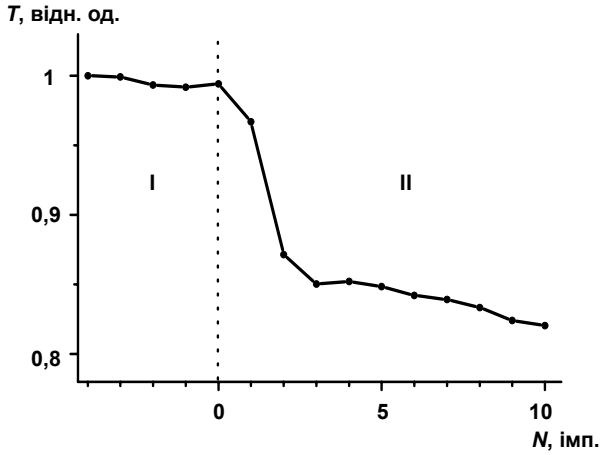

Рис. 1. Нормоване пропускання суспензії на довжині хвилі 1064 нм як функція дози лазерного опромінювання для вуглецевої суспензії в епоксидній смолі. Область I – низькоінтенсивне збудження, область II – високоінтенсивне збудження

В області II пропускання суспензії залежить від дози опромінення. Помітне зменшення пропускання відбувається після перших 2–3 імпульсів опромінення. При подальшому опроміненні пропускання суспензії продовжує поступово зменшуватися.

© Гаращенко В., Зеленський С., Копишинський О., 2014

Наведені на рис. 1 результати можна інтерпретувати як прояв ефекту оптичного обмеження в полімерній суспензії вуглецевих мікрочастинок. Дійсно, інтенсивне лазерне опромінення зумовлює зменшення пропускання суспензії, внаслідок чого спостерігається самонаведене ослаблення лазерного випромінювання.

Механізм взаємодії лазерного випромінювання з полімерними суспензіями вуглецевих мікрочастинок було запропоновано в роботах [3, 7, 14]. Вуглецева мікрочастинка, поглинаючи лазерне випромінювання, розігрівається до декількох тисяч градусів. При цьому в прилеглих до частинки шарах відбувається термічне розкладання олігомерів, які входять до складу епоксидної смоли. Процес термічного розкладання речовини при відсутності прямого доступу кисню називається піролізом. Відомо, що при піролізі епоксидних смол утворюються як гази (CO_2, CO, H_2, CH_4, тощо), так і нелетучі карбонізовані залишки, які складаються переважно з вуглецю і за певних умов здатні утворювати поруваті структури [15, 16]. Газові продукти розпаду епоксидної смоли утворюють мікробульбашки, а карбонізовані залишки формують навколо мікрочастинки оболонку, яка здатна поглинати лазерне випромінювання [3, 7, 14].

Таким чином в опроміненій суспензії утворюються складні центри поглинання, які складаються з вуглецевого ядра і світлопоглинальної оболонки. До того ж, в околі таких центрів утворюються газонаповнені мікробульбашки, які розсіюють лазерне випромінювання. Очевидно, що утворення додаткових центрів поглинання і розсіяння зумовлює зменшення пропускання суспензії при лазерному опроміненні.

Розігрів частинки до високих температур із подальшим випаровування матеріалу із її поверхні призводить до зменшення розміру центрів поглинання. Наявність полімерної матриці навколо розжареної частинки веде до появи карбонізованих продуктів піролізу в її околі, що збільшує розмір центрів поглинання. Присутність таких протилежно діючих ефектів при лазерному опроміненні полімерної суспензії вуглецевих мікрочастинок відкриває можливість до конструювання оптичних обмежувачів із наперед заданими властивостями.

Для використання суспензії в якості оптичного обмежувача важливо знати час релаксації індукованих лазерним випромінюванням змін оптичних характеристик суспензії. Для цього за методикою збуджуючого та скануючого лазерного променя реєструвалась кінетика пропускання суспензії вуглецевих мікрочастинок в епоксидній смолі. Результат представлено на рис. 2, крива 1. Пропускання реєструвалось при кімнатній температурі на довжині хвилі 632,8 нм. Момент проходження потужного лазерного імпульсу (1,06 мкм, 90 МВт/см^2) позначено на рис. 2 стрілкою. Для порівняння на рис. 2, крива 2 наведено кінетику пропускання суспензії вуглецевих мікрочастинок у воді.

Відмітимо, що на довжині хвилі 632,8 нм індуковане лазером зменшення пропускання для епоксидної суспензії в більше як 2 рази перевищує відповідну величину для водної суспензії. Отже, суспензія вуглецевих мікрочастинок в епоксидній смолі ефективніша в якості оптичного обмежувача, ніж водна суспензія.

Релаксація індукованих лазерним випромінюванням змін у водних суспензіях відбувається за час ~ 100 мс, а пропускання епоксидної суспензії в такому часовому масштабі лишається майже незмінним. Подальші виміри показали, що пропускання епоксидної суспензії повертається до величини, близької до початкового значення, протягом 8–10 с.

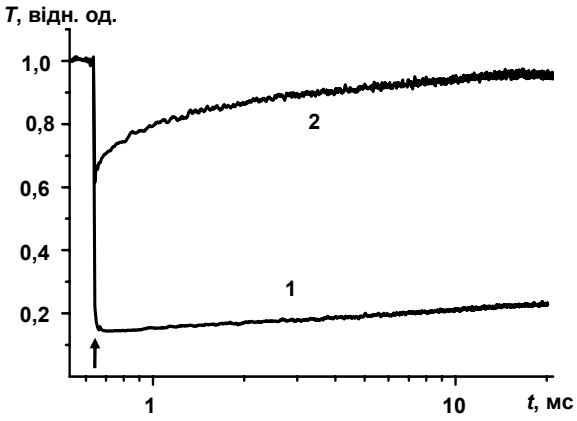

Рис. 2. Кінетика пропускання вуглецевої суспензії на довжині хвилі 632,8 нм при кімнатній температурі в епоксидній смолі (крива 1) та у воді (крива 2). Момент проходження потужного лазерного імпульсу позначено стрілкою

В водних суспензіях швидка релаксація зумовлена тим, що мікробульбашки заповнені, в основному, водяним паром. Після закінчення лазерного імпульсу опромінення температура швидко зменшується, пар конденсується і мікробульбашки зникають [13, 17, 18].

В полімерних суспензіях довготривала релаксація зумовлена тим, що мікробульбашки заповнені газовими продуктами піролізу і існують тривалий час після закінчення імпульсу опромінення, дещо змінюючи свій розмір. Повільне збільшення пропускання за час ~ 10 с можливо пояснити одночасною дією наступних факторів: спливанням мікробульбашок із лазерного треку, та розчиненням їх вмісту у оточуючому шарі полімеру.

Тривала релаксація наведених змін суспензії вуглецевих мікрочастинок в епоксидній смолі є певною вадою для побудови оптичних обмежувачів на її основі. Проте можливо модифікувати фізичні властивості епоксидної смоли для зменшення часу релаксація індукованих змін.

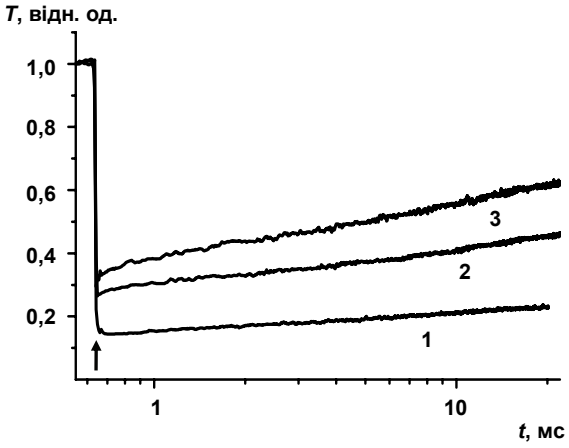

Рис. 3. Кінетика пропускання вуглецевої суспензії в епоксидній смолі на довжині хвилі 632,8 нм. Температура суспензії: 20 ºС (крива 1), 32 ºС (крива 2), 52 ºС (крива 3). Момент проходження потужного лазерного імпульсу позначено стрілкою

Найпростішою модифікацією є нагрівання суспензії. Час спливання газових бульбашок в епоксидній смолі залежить від її в'язкості, а підвищення температури смоли на 10 ºС веде до зменшення її в'язкості в 2–3 рази. Розчинність газів в епоксидній суспензії зростає при збільшенні температури.

Результати дослідження кінетики пропускання суспензії вуглецевих мікрочастинок в епоксидній смолі в залежності від її температури представлено на рис. 3. Як і раніше, момент проходження потужного лазерного імпульсу (1,06 мкм, 90 МВт/см^2) позначено на рисунку стрілкою. Видно, що збільшення температури суспензії веде до зростання швидкості релаксації пропускання після опромінення, що в свою чергу дозволить суттєво скоротити час, за який пропускання суспензії повертається до рівня близького початковому. Проте недоліком такого методу є необхідність підтримувати температуру суспензії вище 50 ºС.

Іншим способом модифікації властивостей епоксидної суспензії вуглецевих мікрочастинок було додавання до суспензії розчинника (ацетону) при кімнатній температурі із наступним розмішуванням до однорідного стану.

На рис. 4 представлено залежності перерізу розсіяння газової бульбашки від часу $\sigma'(t)$ при проходженні імпульсу збудження для чистої вуглецевої епоксидної суспензії (крива 1) та сумішей епоксидної суспензії і розчинника із об'ємною його часткою в суміші: 14,2 % (крива 2) та 25 % (крива 3).

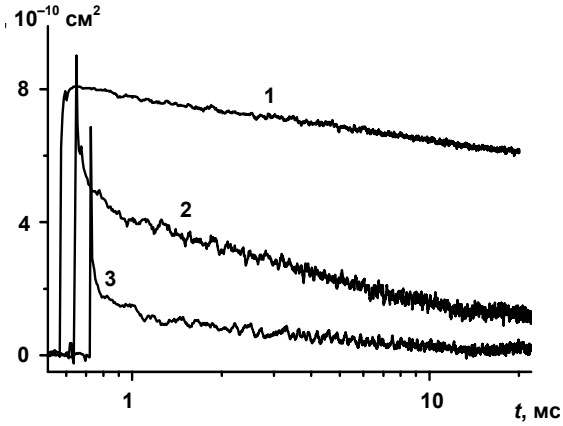

Рис. 4. Залежність перерізу розсіяння газової бульбашки на довжині хвилі 632,8 нм від часу в вуглецевій суспензії в епоксидній смолі з додаванням ацетону. Об'ємна частка ацетону становить 0 % (крива 1), 14,2 % (крива 2), 25 % (крива 3). Момент проходження потужного лазерного імпульсу відповідає різкому зростанню перерізу розсіяння

Перехід від представлення кінетики як залежності пропускання (рис. 2 та 3) до залежності перерізу розсіяння від часу (рис. 4) зумовлено необхідністю при порівнянні серії кривих враховувати зміну концентрації світлопоглинальних частинок в суспензії. При додаванні розчинника, що не містить центрів поглинання, концентрація частинок в суспензії зменшується. Залежність пропускання суспензії від її товщини описується законом Ламберта-Бера. Коефіцієнт поглинання можливо представити добутком перерізу екстинкції світлопоглинальних частинок σ та їхньої концентрації c. Концентрацію світлопоглинальних частинок в суспензії можна розрахувати за значенням пропускання $T_1 = \exp(-\sigma cz)$ шару зразка відомої товщини z та розрахованого за теорією Мі перерізу екстинкції σ вуглецевих частинок відомого розміру в полімері. Позначимо через $T_2(t)$ пропускання суспензії після дії одиночного потужного лазерного імпульсу. Припускаємо, що зменшення пропускання суспензії відбувається лише завдяки розсіянню скануючого випромінювання на індукованих лазером мікробульбашках. Тоді $T_2(t) = \exp(-(\sigma + \sigma'(t))cz)$, де $\sigma'(t)$ – переріз розсіювання мікробульбашок. Величина $\sigma'(t)$ розраховувалась за формулою $\sigma'(t) = (cz)^{-1} \ln(T_1/T_2(t))$.

Видно, що додавання розчинника значно прискорює релаксацію наведених змін в епоксидній суспензії вуглецевих мікрочастинок, що робить таку суміш більш придатною для використання в якості оптичного обмежувача. Крім того, у кінетиці розсіювання суспензій з розчинником з'являється швидка компонента (рис. 4, криві 2 та 3). Ми припускаємо, що такі зміни можуть бути пов'язані із наступними чинниками:

- зменшення в'язкості суміші впливає як на швидкість розчинення газового наповнення індукованих лазерним випромінюванням мікробульбашок, так і на швидкість виходу бульбашок із лазерного треку;
- присутність в суміші летючої речовини (ацетону) веде до зміни газового складу бульбашок, що впливає на швидкість їх розчинення.

Висновки. Суспензії вуглецевих мікрочастинок в епоксидній смоли з розчинником є багатообіцяючим об'єктом із сильними обмежувальними властивостями та керованим часом релаксації наведених лазерним випромінюванням змін. Так суміш може бути використана для побудови оптичних обмежувачів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Vander Wal R.L.* Laser-induced incandescence: development and characterization towards a measurement of soot-volume fraction / Vander Wal R.L., K.J. Weiland // Appl. Phys. B. – 1994. – V. 59. – P. 445–452.
2. *Shaddix C.R.* Laser-induced incandescence measurements of soot production in steady and flickering methane, propane, and ethylene diffusion flames / C.R. Shaddix, K.C. Smyth // Combustion and Flame. – 1996. – V. 107. – P. 418–452.
3. *Thermal* emission of carbon microparticles in polymer matrixes under pulsed laser excitation / S.E. Zelensky, A.S. Kolesnik, A.V. Kopyshinsky et al. // Ukrainian Journal of Physics. – 2009. – V. 54, N. 10. – P. 983–988.
4. *Zelensky S.* Laser-induced incandescence of suspended particles as a source of excitation of dye luminescence / S. Zelensky // Journal of Luminescence – 2003. – V. 104, N. 12. – P. 27–33.
5. *Kopyshinsky A.V.* Laser-induced incandescence of borate glass doped with carbon microparticles / A.V. Kopyshinsky, Ya.P. Lazorenko, S.E. Zelensky // Functional Materials. – 2011. – V. 18, N. 1. – P. 116–120.
6. *Preparation* of carbon nanoparticles with strong optical limiting properties by laser ablation in water / G.X. Chen, M.H. Hong, T.C. Chong et al. // J.Appl.Phys.– 2004 – V. 95, N. 3. – P. 1455–1459.
7. *Optical* transmittance of carbon suspensions in polymer matrixes under powerful pulsed laser irradiation / S.E. Zelensky, A.V. Kopyshinsky, V.V. Garashchenko et al. // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. – 2010. – V. 13, N 1. – P. 70–73.
8. *Belousova I.M.* Theoretical investigation of nonlinear limiting of laser radiation power by suspensions of carbon particles / I.M. Belousova, M.S. Mironova // Optics and Spectroscopy. – 2003. – V. 94, N. 1. – P. 86–91.
9. *Sommer R.* Application of laser-induced incandescence to suspended carbon black particles / R. Sommer, A. Leipertz // Optics Letters. – 2007. V. 32, N. 13. – P. 1947–1949.
10. *Role* of host liquid in optical limiting in ink suspensions / S.K. Tiwari, M.P. Joshi, M. Laghate et al. // Optics & Laser Technology. – 2002. – V. 34. – P. 487–491.
11. *Nashold K.M.* Investigations of optical limiting mechanisms in carbon particle suspensions and fullerene solutions / K.M. Nashold, D.P. Walter // J. Opt. Soc. Am. B. – 1995. – V. 12, N. 7. – P. 1228–1237.
12. *Sun X.* Investigation of an optical limiting mechanism in multiwalled carbon nanotubes / X. Sun, Y. Xiong, P. Chen // Appl. Opt. – 2000. – V. 39, N. 12. – P. 1998–2001.
13. *Vivien L.* Carbon nanotubes for optical limiting / L. Vivien, P. Lancon, D. Riehl // Carbon. – 2002. – V. 40. – P. 1789–1797.
14. *Kinetics* of light scattering in carbon microparticles suspension in epoxy resin / *S.E. Zelensky, A.V. Kopyshinsky, V.V. Garashchenko et al.* // Journal of Applied Spectroscopy. – 2011. – V. 78, N 3 – P. 389–395.
15. *Laser* productions of fullerene ions promoted by additive compounds in carbon targets / Z-C. Tang, R-B. Huang, H. Chen et al. // J. Phys. Chem. A. – 1998. – V. 102, N. 49. – P. 9993–9998.
16. *Фарберова И.Л.* Термический и окислительный пролиз топлив и высокополимерных материалов / И.Л. Фарберова. – М., 1966.
17. *Picosecond* and nanosecond polychromatic pump–probe studies of bubble growth in carbon-nanotube suspensions / L. Vivien, D. Riehl, J-F. Delouisand et al. // J.Opt.Soc.Am.B. – 2002. – V. 19, N. 2. – P. 208–214.
18. *The* investigation of nonlinear optical limiting by aqueous suspensions of carbon nanoparticles / I.M. Belousova, N.G. Mironova, A.G. Scobelev et al. // Optics Communications. – 2004. – V. 235. – P. 445-452.

Надійшла до редакції 24.05.14

В. Гаращенко, канд. физ.-мат. наук,
Институт сверхтвердых материалов им. В. М. Бакуля НАН Украины, Киев,
С. Зеленский, д-р фиіз.-мат. наук, проф.,
О. Копишинський, канд. физ.-мат. наук, доц.
КНУ имени Тараса Шевченко, Киев

ОПТИЧЕСКОЕ ОГРАНИЧЕНИЕ В СУСПЕНЗИЯХ УГЛЕРОДНЫХ МИКРОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ЭПОКСИДНОЙ СМОЛЫ

В работе исследовано эффект оптического ограничения в эпоксидных суспензиях углеродных микрочастиц. Выявлено, что кинетика пропускания суспензии зависит как от ее температуры, так и от содержания растворителя. Показано, что добавление до эпоксидной суспензии растворителя улушает ее ограничительные свойства и делает такую смесь пригодной для использования как оптический ограничитель.

Ключові слова: эффект оптического ограничения, эпоксидная суспензия, углеродные микрочастички.

V. Herashchenko Dr. Sci. (Phys.-math),
Bakul Institut of superhard matherials, Kyiv,
S. Zelenskij Dr. Sci. (Phys.-math),
O. Kopyshinskij Dr. Sci. (Phys.-math),
National Taras Shevchenko University of Kiev

THE OPTICAL LIMITING PROPERTIES OF EPOXY RESIN SUSPENSIONS OF CARBON MICROPARTICLES

It shows the optical limiting properties of epoxy resin suspensions of carbon microparticles. The study of relaxation time after laser irradiation of epoxy resin carbon suspension was made. It was found that the solvent addition to the epoxy suspension improves its limiting properties and makes the following mixture applicable to construction of optical limiters.

Keywords: optical limiting properties, epoxy resin suspensions, carbon microparticles.

УДК 621.762

О. Попов, канд. фіз.-мат. наук, доц.,
В. Бойко, студ., П. Ліщук, студ., В. Мельник, студ., М. Мельниченко, студ.,
О. Прокопов, студ., В. Федорець, студ., Є. Ярмощук, студ.
КНУ імені Тараса Шевченка, Київ

ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ ТУГОПЛАВКИХ ФАЗ В ПРОЦЕСІ РЕАКЦІЙНОГО ПРЕСУВАННЯ ПОРОШКОВОЇ СУМІШІ Al_2O_3-SiO_2-C-Al

Досліджено процеси формування тугоплавких фаз внаслідок нагрівання суміші порошків SiO_2-Al_2O_3-Al-C. Показано, що гаряче пресування досліджуваної системи при температурі 1800 ^{0}C та тиску 18 МПа призводить до формування композиційного матеріалу на основі субмікронних зерен оксиду алюмінію та карбіду кремнію.

Ключові слова: карбід кемнію, композиційні матеріали, гаряче пресування.

Вступ. Проблема утилізації відходів важкої промисловості, які, головним чином, складаються із оксидів алюмінію та кремнію, є важливою задачею матеріалознавства. Одним зі способів вирішення цієї проблеми може бути виготовлення з них тугоплавкого керамічного матеріалу.

Керамічні композити на основі Al_2O_3 інтенсивно вивчаються через їх високу твердість та хорошу хімічну стійкість. Додавання ж до оксиду алюмінію зерен SiC призводить до значного поліпшення механічних властивостей, таких як твердість, модуль Юнга, тріщиностійкість, міцність на вигин [1].

У роботі [2] описано послідовність виготовлення композитів Al_2O_3 – SiC-C та Al_2O_3 –SiC методом гарячого пресування. Ущільнення матеріалів відбувалось у вакуумній печі протягом 1 години за температури 1635°C при тиску 25 МПа. Найкраща тріщиностійкість спостерігалась у зразку із 1% мас. SiC і дорівнювала 5,1 МПа·м$^{1/2}$, в той час, як найбільша міцність на вигин становила 516 МПа. У роботі [3] досліджувались механічні властивості матеріалів Al_2O_3–SiC, які виготовлялись аналогічно [2], при температурах від 1635 °C до 1735 °C. Результати експерименту показали, що міцність на вигин підвищується зі збільшенням щільності та подрібненням зерна. Найвища межа міцності на вигин – 615 МПа – була отримана для композитів 20 % мас. SiC, спечених при 1735 °C.

Перспективним способом виробництва кераміки є метод реакційного синтезу, коли необхідні фази формуються в процесі гарячого пресування вихідних порошків [4]. Даний спосіб, як це показано в [4], дозволяє знизити температуру і час ізотермічної витримки.

Представлена робота є вивченням можливості отримання компактних зразків системи Al_2O_3–SiC методом реакційного синтезу порошків оксидів алюмінію та кремнію з вуглецем та алюмінієм згідно з наступним рівнянням реакції:

$$3SiO_2 + 4Al + 3C + 2Al_2O_3 \rightarrow 4Al_2O_3 + 3SiC. \quad (1)$$

Додавання оксиду алюмінію до початкової реакційної суміші дає можливість наблизити склад шихти до складу відходів важкої промисловості.

Методика виготовлення та дослідження зразків Для виготовлення шихти змішувались порошки SiO_2 (розмір зерен 100 нм), C (1 мкм) та Al (1 мкм) у планетарному млині протягом однієї години. Отримана суміш висушувалась та пресувалась в графітовій прес-формі без захисної атмосфери при тисках 18–27 МПа протягом 4–16 хв. при температурах 1500–1900 °C. Швидкість нагрівання після T = 1000 °C сягала 50°C/хв. Отриманий матеріал шліфувався за допомогою 30-мікронного алмазного порошку та полірувався алмазними пастами різної дисперсності. Умови отримання зразків наведені в табл. 1.

© Попов О., Бойко В., Ліщук П., Мельник В., Мельниченко М., Прокопов О., Федорець В., Ярмощук Є., 2014

Таблиця 1

Умови отримання виготовлених зразків

№ зразка	T_1, °C	t_1, хв	T_2, °C	t_2, хв	P, МПа
1	1500	4	1800	8	18
2	1500	16			18
3	1500	4	1700	16	18
4	1500	4	1750	4	27
5	1500	4	1800	4	18
6	1500	16	1800	4	27
7	1500	4	1800	4	
8	1500	4	1900	4	18

У результаті отримали зразки циліндричної форми висотою 3 мм та діаметром 10 мм. Їх мікротвердість визначалася за методом Вікерса [5], а тріщиностійкість – методом індентування (при навантаженні на індентор 100 Н) [6].

Дослідження фазового складу зразків проводили за даними рентгенівського фазового аналізу, які отримали з використання установки ДРОН-3. Структуру зразків досліджували за допомогою оптичної та електронної мікроскопії та рентгенівського мікроаналізу.

Результати та їх обговорення Аналіз літературних даних [2,3] вказує на те, що ефективне ущільнення тугоплавких матеріалів на основі оксиду алюмінію та карбіду кремнію відбувається при температурах, вищих за 1600°C. З іншого боку, за допомогою аналізу залежності потенціалу Ґіббса досліджуваних з'єднань від температури, дозволяє припустити, що при підвищенні температури вище 1500°C буде починатись відновлення кремнію вуглецем з його оксиду з утворенням CO, а при температурі, вищій за 1800°C подібна реакція буде характерною також і для оксиду алюмінію.

Для запобігання протіканню вказаних процесів було вирішено реалізувати двохстадійне нагрівання із проміжною витримкою порошкової суміші при температурі 1500°C з метою зв'язування кисню з оксиду кремнію алюмінієм та запобігання його виділення у вигляді CO.

Рентгенівський фазовий аналіз зразка № 5 (див. табл. 2) підтверджує протікання фазових перетворень при нагріванні порошкових сумішей.

Таблиця 2

Хімічний склад отриманих зразків

№ Зразка	Al_2O_3	SiC	SiO_2 (quartz)	SiO_2	$Al_{4.75}Si_{1.25}O_{9.63}$	Al_2SiO_5
1	72	15	–	–	–	13
2	47,7	7,3	0,6	3,2	41,1	–
5	31	8	–	–	61	–
6	74	26	–	–	–	–

Однак, не зважаючи на очікуване утворення карбіду кремнію, частина оксиду кремнію виявилась зв'язаною із оксидом алюмінію, утворивши складну потрійну сполуку $Al_{4.75}Si_{1.25}O_{9.63}$.

Як видно із таблиці 2, продовження витримки при температурі 1800°C до 8 хвилин призводить до суттєвого зниження концентрації оксиду алюмінію кремнію у складі матеріалу, однак, продовження витримки при 1500°C до 16 хвилин із послідуючим нагріванням до 1800°C (зразок №6) призводить до остаточного розпаду потрійної сполуки та формування окремих фаз карбіду кремнію та оксиду алюмінію.

Електронно-мікроскопічні дослідження шліфів виготовлених зразків вказують на те, що структура всіх синтезованих матеріалів, окрім зразка № 2, являє собою відносно гладку матрицю, яка, виходячи із елементного аналізу, складається, здебільшого, з речовини на основі алюмінію та кисню, а також включень неправильної форми розміром 1-10 мкм, збагачених кремнієм та вуглецем (рис. 1).

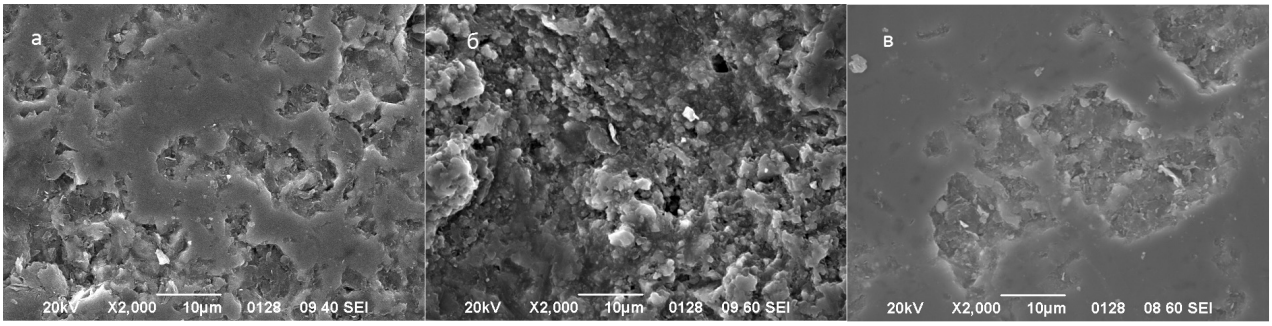

Рис. 1. Зображення зразка №1(а), №2(б), №3(в) отримане за допомогою скануючого електронного мікроскопа

Слід зазначити, що кремній, так само, як і вуглець, рівномірно розподілений по поверхні зразка № 2, виготовленого при температурі 1500°C протягом 16 хвилин (рис. 2а). Нагрівання суміші до температури 1800 °C (зразок № 6, рис. 2 б) призводить до розділення елементів та формування областей, збагачених кремнієм та вуглецем, в яких майже відсутні кисень та алюміній. Ці області розташовані здебільшого у "впадинах" шліфів. В той же час, області матеріалу, що складаються з кисню та алюмінію, характерні гладкою поверхнею.

Отже, формування структури композицій-ного матеріалу відбувається наступним чином. Спочатку, при температурі 1500°C, відбувається відновлення оксиду кремнію алюмінієм із утворенням оксисиліциду алюмінію. При цьому частина вуглецю взаємодіє з кремнієм із утворенням SiC. Подальше нагрівання суміші до температури 1800 °C прискорює взаємодію та спричинює виділення кремнію з $Al_{4.75}Si_{1.25}O_{9.63}$ з формуванням Al_2O_3 та SiC. У разі недостатнього часу витримки шихти при 1500 °C частина оксиду кремнію не встигає провзаємодіяти із алюмінієм, що, під час подальшого підвищення температури, призводить до часткового відновлення оксиду кремнію вуглецем із утворенням CO. У цьому випадку надлишок кремнію щодо реакції (1) залишається в з'єднанні $Al_{4.75}Si_{1.25}O_{9.63}$.

Виміряні значення мікротвердості та тріщиностійкості зразків досягають H_v=12 ГПа та K_{1C}=3,7 МПа·м$^{1/2}$.

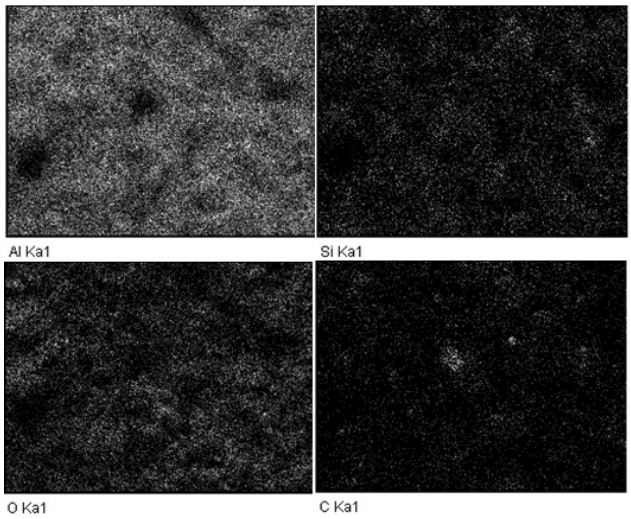

Рис. 2а. Елементний аналіз зразка № 2

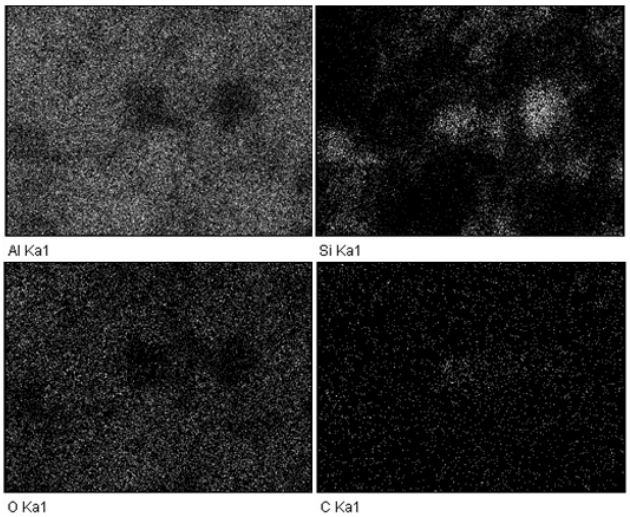

Рис. 2б. Елементний аналіз зразка № 6

Висновки. В цілому аналіз експериментальних даних, представлених в роботі, дозволяє зробити наступні висновки:

1 Гаряче пресування суміші порошків Al_2O_3 та SiO_2 з додаванням вуглецю та алюмінію при температурі 1500 °С та тиску 18 МПа протягом 16 хвилин призводить до відновлення оксиду кремнію та формування композиційного матеріалу складу Al_2O_3 – SiC – C – $Al_{4.75}Si_{1.25}O_{9.63}$. Подальше нагрівання шихти до температури 1800 °С спричинює подальше відновлення кремнію та синтез композиційного матеріалу системи Al_2O_3 – SiC.

2. Структура синтезованого композиційного матеріалу являє собою матрицю оксиду алюмінію з включеннями, що складаються здебільшого з субмікронних зерен карбіду кремнію.

3. Досліджений процес формування тугоплавких фаз під час гарячого пресування може бути використаний для створення керамічних матеріалів із відходів виробництва важкої промисловості.

4. Значення мікротвердості та тріщиностійкості досліджуваних зразків досягають H_v=12 ГПа та K_{1C}=3,7 МПа·м$^{1/2}$.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Stefano Guicciardi.* Dry Sliding Wear Behavior of Al_2O_3 – SiC Submicro- and Nano-Composites / Stefano Guicciardi, Diletta Sciti, Cesare Melandri, Alida Belosi // J. Am. Ceram. Soc., 88[1], 2005.

2. *Hot-pressed* Al_2O_3 – SiC(-C) composites with polycarbosilane as the precursor / Xiaolei Shi, Yi Tan, Fumin Xu et al. // Materials and Design, 2009 .

3. *Mechanical* properties of hot-pressed Al_2O_3/SiC composites / X.L. Shi, F.M. Xu, Z.J. Zhang et al. // Materials Science and Engineering A, 2010.

4. *Попов А.Ю.* Структурно-фазовые превращения в процессе синтеза композиционных материалов на основе карбидов и боридов титана и гафния с ультрадисперсными включениями углерода / А.Ю. Попов, И.Ф. Казо, В.А. Макара, С.В. Чорнобук // Материаловедение. – 2007. – № 7. – С. 54–56.

5. *Григорович В.К.* Твердость и микротвердость металлов / В.К. Григорович. – М.: Наука, 1976. – 230 с.

6. *Evans A.G.* Fracture toughness Determination by Indentation / A.G. Evans, E.A. Charles // J. Amer. Ceram. Soc. – 1977.– Vol. 59, № 7. – P. 371– 372.

Надійшла до редколегії 30.04.14

О. Попов, канд. физ.-мат. наук, доц., В. Бойко студ.,
П. Лищук, студ., В. Мельник студ., М. Мельниченко студ.,
О. Прокопов, студ., В. Федорец, студ., Е. Ярмощук студ.,
КНУ имени Тараса Шевченко, Киев

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ТУГОПЛАВКИХ ФАЗ В ПРОЦЕССЕ РЕАКЦИОННОГО ПРЕССОВАНИЯ ПОРОШКОВОЙ СМЕСИ Al_2O_3-SiO_2-C-Al.

Исследованы процессы формирования тугоплавких фаз вследствие нагрева смеси порошков SiO_2-Al_2O_3-Al-C. Показано, что горячее прессование исследуемой системы при температуре 1800 ^{0}C и давлении 18 МПа приводит к формированию композиционного материала на основе субмикронных зерен оксида алюминия и карбида кремния.

Ключевые слова: карбид кремния, композиционные материалы, горячее прессование.

O. Popov, Dr. Sci. (Phys.-math), V. Boiko, stud., P. Lishchuk, stud.,
V. Melnik, stud., M. Melnichenko, stud., O. Prokopov, stud.,
V. Fedorec, stud., E. Yarmoshchuk stud.,
National Taras Shevchenko University of Kiev

FORMATION FEATURES OF REFRACTORY PHASES DURING THE REACTIONARY COMPACTION OF POWDER MIXTURES OF AL_2O_3-SIO_2-C-AL

Refractory phase formation during SiO_2-Al_2O_3-Al-C powder mixture heating is investigated. It is shown that hot pressing of the mixture at 1800 ^{0}C and 18 MPa leads to composite material based on SiC and Al_2O_3 submicron grains formation.

Keywords: silicon carbide, composite material, hot pressing.

УДК 530.145(049.3):532.11:534.0:539.21

А. Супрун, канд. фіз.-мат. наук,
Л. Шмельова, канд. фіз.-мат. наук
КНУ імені Тараса Шевченка, Київ

ЦЕНТРАЛЬНО СИМЕТРИЧНІ СОЛІТОНИ ДЛЯ ЕЛЕКТРОННИХ ЗБУДЖЕНЬ ТВЕРДИХ ТІЛ

Отримано аналітичні розв'язки у вигляді центральносиметричних солітонів для нелінійних рівнянь Шредінгера з різними варіантами нелінійності. Показано, що динамічні властивості збудження тотожні динаміці не автолокалізованої квазічастинки, тобто динаміці вільної релятивістської частинки. Важливою особливістю отриманих розв'язків є те, що їх амплітуди (або квадрати амплітуд) мають степеневу асимптотику у нескінченно віддаленій точці.

Ключові слова: центральносиметричні солітони, електронні збудження, авто локалізовані квазічастинки.

1. Вступ

Солітонні збудження у твердих тілах являють собою розвиток концепції традиційних електронних збуджень (інжектовані електрони, екситони) або збуджень іншої фізичної природи (магнони [12], полярони [5], тощо). Основною ознакою солітонного збудження є поява розподіленої у просторі і часі амплітуди. Вона виникає за рахунок нелінійності, а та, в свою чергу, обумовлена взаємодією збудження з граткою.

В роботі розглядаються аналітичні розв'язки нелінійних рівнянь Шредінгера (НРШ) з різними варіантами нелінійностей у вигляді центральносиметричних солітонів для. Ці рівняння є актуальними, зокрема, для електронних збуджень твердого тіла, тому що вони враховують реакцію кристалічної гратки на електронні збудження. Проаналізовано їх динамічні властивості, що є важливим для інтерпретації експериментальних результатів у широкому діапазоні параметрів (хвильових векторів, квазіімпульсів, динамічних ефективних мас, швидкостей, тощо). Зокрема, для інтерпретації переносу енергії [10, 14], заряду [15], або інших фізичних характеристик [1, 11]. Тут не останній інтерес має проблема повнішого розуміння фізичних властивостей реальних частинок.

Загальні динамічні властивості солітонів базуються на одній з найважливіших характеристик матеріалів і середовищ при їх збудженні – на дисперсійній залежності енергії або частоти від хвильового вектора [3, 8, 13, 17]. На відміну від попередніх досліджень [19] і в розвиток деяких інших з них [6, 7] враховується вплив на ці властивості нелінійностей. Походження різних типів нелінійностей пов'язане з різними наближеннями на реакцію кристалічної решітки при збудженні.

2. Солітонні збудження у твердих тілах. Загальні зауваження

Найпростіший гамільтоніан електронних збуджень у твердих тілах з врахуванням локального відгуку кристалічної гратки на збудження можна привести до такого загального вигляду [6, 20]:

$$E_f\left(\{a\}\right)=(1/2)\left\{\sum_{\mathbf{nl}}{}^{/}w_{\mathbf{n,n+l}}+\sum_{\mathbf{n}}D^f_{\mathbf{n}}\cdot\left|a_{fn}\right|^2+\sum_{\mathbf{n}}G^f_{\mathbf{n}}\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)+\right.$$
$$\left.+\sum_{\mathbf{nl}}{}^{/}M^f_{\mathbf{n,n+l}}\cdot\left(a^*_{fn}a_{f,\mathbf{n+l}}+a^*_{f,\mathbf{n+l}}a_{fn}\right)\right\} \quad (1)$$

Цей гамільтоніан описує, наприклад, електрон, інжектований у зону провідності напівпровідника або діелектрика. Також він описує збудження екситона Френкеля у молекулярних кристалах або будь-яке інше збудження, описання якого може бути зведене до одночастинкового. Цей гамільтоніан відрізняється від стандартного гамільтоніана [19] наявністю факторів $G^f_{\mathbf{n}}\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)$. Штрихи у символів подвійних суми тут означають, що вектори гратки задовольняють умові: $\mathbf{n}\neq\mathbf{n}+\mathbf{l}$. Фактор a_{fn} означує просторово-часовий розподіл збудження в межах кристалу та часу життя цього збудження. Він підлягає визначенню. Для цього використовується процедура [14, 6] динамічної Гамільтонової мінімізації функціоналу (1). Матричні елементи $w_{\mathbf{n,n+l}}$, $D^f_{\mathbf{n}}$ та $M^f_{\mathbf{n,n+l}}$ для простих (або наближено простих) кристалів мають точне означення [6].

Функція $G^f_{\mathbf{n}}\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)$ з'являється у функціоналі (1) за рахунок відмови від третьої умови ідеальності кристалу, яка пов'язана з нехтуванням реакції кристалічної гратки на збудження. Її важливою властивістю є те, що при виконанні перших двох умови ідеальності кристалу (нескінченність та відсутність неоднорідностей простору) вона втрачає зовнішній індекс $\mathbf{n}$. Ця властивість надалі буде вважатися завжди виконаною. Поблизу нуля вона має наступні асимптотичні властивості, актуальні для подальшого: її розкладання в ряд починається з доданку $\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)^2\equiv\left|a_{fn}\right|^4$, якщо вона не має симетрії, або якщо має парну симетрію; якщо ж вона має непарну симетрію, то розкладання починається з доданку $\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)^3\equiv\left|a_{fn}\right|^6$. "Нові" рівноважні значення векторів постійних кристалічної гратки $\mathbf{b}^f_{\mathbf{n}}$ у випадку слабкої реакції гратки на збудження, в залежності від парності, пов'язані із "старими" їх значеннями $\mathbf{b}$ співвідношеннями:

$$\mathbf{b}^f_{\mathbf{n}}=\mathbf{b}-\boldsymbol{\gamma}_{fn}\cdot\left|a_{fn}\right|^2+\cdots,\ \text{або}\ \ \mathbf{b}^f_{\mathbf{n}}=\mathbf{b}-\boldsymbol{\gamma}_{fn}\cdot\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)^2+\cdots. \quad (2)$$

Параметри $\boldsymbol{\gamma}_{fn}$ теж не залежать від вектора $\mathbf{n}$, якщо перші дві умови ідеальності вважаються виконаними.

Розглядаючи далі тільки ситуацію, коли виконані перші дві умови ідеальності, функціонал (1) можна привести до значно простішого вигляду:

$$E_f\left(\{a\}\right)=E^{(0)}_f+(1/2)\sum_{\mathbf{n}}\left\{G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)+\sum_{\mathbf{l}(\neq\mathbf{0})}M^f_{\mathbf{l}}\cdot\left(a^*_{fn}a_{f,\mathbf{n+l}}+a^*_{f,\mathbf{n+l}}a_{fn}\right)\right\}. \quad (3)$$

Позначення: $E^{(0)}_f\equiv U_0+D^f_{\mathbf{0}}N_f/2$ – фіксована частина енергії (3); $U_0\equiv\sum_{\mathbf{nl}}{}^{/}w_{\mathbf{nl}}/2$ –потенціальна енергія всього кристалу; фактор $N_f\equiv\sum_{\mathbf{n}}\left|a_{fn}\right|^2$ є нормою величин a_{fn} по змінній $\mathbf{n}$. Далі розглядатимуться декілька варіантів наближених представлень функції $G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)$ у вигляді розкладань в ряди Тейлора, як це робиться зазвичай.

3. Солітонні збудження у твердих тілах. Кубічна нелінійність

Цей випадок, мабуть, є найбільш дослідженим [4, 6, 7, 10, 12, 14, 19, 20]. Тому на ньому легко ілюструвати і використовувати далі принципові моменти постановок задач та їх розв'язків щодо інших варіантів нелінійнос-

© Супрун А., Шмельова Л., 2014

тей. Він відповідає ситуації парної симетрії функції $G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)$ і має місце представлення:

$$G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right) = -\left(G_f/2\right)\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)^2 \equiv -\left(G_f/2\right)\left|a_{fn}\right|^4 .$$

Множник 1/2 введено для зручності наступного розгляду. У типових випадках $G_f > 0$. Функціонал (3) при цьому набуває вигляду:

$$E_f\left(\{a\}\right) = E_f^{(0)} + (1/2)\sum_{\mathbf{n}}\left\{\sum_{\mathbf{l}(\neq 0)} M_{\mathbf{l}}^f \cdot \left(a_{fn}^* a_{f,\mathbf{n}+\mathbf{l}} + a_{f,\mathbf{n}+\mathbf{l}}^* a_{fn}\right) - \left(G_f/2\right)\left|a_{fn}\right|^4\right\}.$$

Використовуючи цей функціонал у процедурі динамічної гамільтонової мінімізації [14,6]:

$i\hbar\left(\partial a_{fn}/\partial t\right) = \partial E_f\left(\{a\}\right)/\partial a_{fn}^*$, можна отримати рівняння:

$$i\hbar\left(\partial a_{fn}/\partial t\right) + G_f\left|a_{fn}\right|^2 a_{fn} + (1/2)\sum_{\mathbf{l}(\neq 0)}\left|M_{\mathbf{l}}^f\right|\left(a_{f,\mathbf{n}+\mathbf{l}} + a_{f,\mathbf{n}-\mathbf{l}}\right) = 0 . \quad (4)$$

Тут було також враховано те, що матричні елементи $M_{\mathbf{l}}^f$ у типових кристалах від'ємні [6].

Оскільки простір кристалу дискретний за змінними $\mathbf{n},\mathbf{m}$, то видно, що (4) являє собою нелінійну систему комплексних рівнянь змішаної диференціально-різницевої природи. Отже спершу слід представити функції a_{fn} у загальному вигляді:

$$a_{fn}(t) = \varphi_{fn}(t)\cdot\exp\left[i\cdot\Gamma_{fn}(t)\right]. \quad (5)$$

Після підстановки (5) у (4) і розділення дійсної та уявної частин, система (4) розпадається на дві підсистеми для визначення амплітуди φ_{fn} та фази Γ_{fn}:

$$\hbar\left(\partial\varphi_{fn}/\partial t\right) + (1/2)\sum_{\mathbf{l}(\neq 0)}\left|M_{\mathbf{l}}^f\right|\left\{\varphi_{f,\mathbf{n}+\mathbf{l}}\sin\left(\Gamma_{f,\mathbf{n}+\mathbf{l}} - \Gamma_{fn}\right) - \right.$$
$$\left. -\varphi_{f,\mathbf{n}-\mathbf{l}}\sin\left(\Gamma_{fn} - \Gamma_{f,\mathbf{n}-\mathbf{l}}\right)\right\} = 0;$$
$$\hbar\varphi_{fn}\left(\partial\Gamma_{fn}/\partial t\right) = G_f\varphi_{fn}^3 +$$
$$+(1/2)\sum_{\mathbf{l}(\neq 0)}\left|M_{\mathbf{l}}^f\right|\left\{\varphi_{f,\mathbf{n}+\mathbf{l}}\cos\left(\Gamma_{f,\mathbf{n}+\mathbf{l}} - \Gamma_{fn}\right) + \varphi_{f,\mathbf{n}-\mathbf{l}}\cos\left(\Gamma_{fn} - \Gamma_{f,\mathbf{n}-\mathbf{l}}\right)\right\}.$$

Так же, як і у [19], далі працюватимемо в узагальненому наближенні плоскої хвилі у фазі:

$$\Gamma_{fn}(t) = \mathbf{k}(t)\cdot\mathbf{n} - \gamma_f(t). \quad (6)$$

Відміна цього представлення від аналогічного роботи [19] в тому, що хвильовий вектор $\mathbf{k}(t)$ та енергетичний фактор $\gamma_f(t)$ (замість добутку $\omega_f t$) є довільними функціями від часу. Їх явний вигляд буде визначатися особливостями динаміки розглядуваного збудження. Тоді для хвильової функції (5) матимемо:

$$a_{fn}(t) = \varphi_{fn}(t)\cdot\exp\left[i\left(\mathbf{k}(t)\cdot\mathbf{n} - \gamma_f(t)\right)\right], \quad (7)$$

а остання система набуває вигляду:

$$\hbar\left(\partial\varphi_{fn}/\partial t\right) + (1/2)\sum_{\mathbf{l}(\neq 0)}\left|M_{\mathbf{l}}^f\right|\sin\left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}\right)\left\{\varphi_{f,\mathbf{n}+\mathbf{l}} - \varphi_{f,\mathbf{n}-\mathbf{l}}\right\} = 0 ; \quad (8)$$

$$(1/2)\sum_{\mathbf{l}(\neq 0)}\left|M_{\mathbf{l}}^f\right|\cos\left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}\right)\left\{\varphi_{f,\mathbf{n}+\mathbf{l}} + \varphi_{f,\mathbf{n}-\mathbf{l}}\right\} +$$
$$+G_f\varphi_{fn}^3 + \hbar\left(\dot{\gamma}_f - \dot{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{n}\right)\varphi_{fn} = 0. \quad (9)$$

Позначення $\dot{\gamma}_f$ та $\dot{\mathbf{k}}$ означають, як завжди, похідні по часу.

Якби підсистема (9) була лінійною, то умовою сумісності (8) та (9), альтернативною до умови $\varphi_{fn}(t) \equiv \varphi_f = \text{constant}$, яка використовувалась у [19], є процедура побудову розв'язку у вигляді розкладання у такий ряд Фур'є: $\varphi_{fn}(t) = \sum_{\mathbf{q}}\psi_{f\mathbf{q}}(\omega)\exp\left\{i\left[\left(\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}\right) - \omega t\right]\right\}$. Тут частотний фактор ω визначається підстановкою цього розкладання у (8). Але амплітуда $\psi_{f\mathbf{q}}(\omega)$ тут залишається невідомою. Вона визначається з підсистеми (9), якщо в ній замість нелінійного доданку стоїть звичний добуток потенціальної енергії на хвильову функцію $\varphi_{fn}(t)$.

Але підсистема (9) нелінійна. Тому тут спершу слід виконати у рівняннях (8), (9) загальне перетворення від різницевого представлення до диференціального: $\varphi_{f,\mathbf{n}\pm\mathbf{l}} \equiv \exp\left[\pm\left(\mathbf{l}\cdot\nabla_{\mathbf{n}}\right)\right]\varphi_f(\mathbf{n})$. Це представлення є компактною формою розкладання в ряд функції $\varphi_{f,\mathbf{n}\pm\mathbf{l}}$ у околі точки $\mathbf{l} = \mathbf{0}$. Також використане перепозначення: $\varphi_{fn} = \varphi_f(\mathbf{n})$, яке означає, що компоненти вектора $\mathbf{n}$ розглядаються як неперервні змінні. На них діють компоненти диференціального оператора $\nabla_{\mathbf{n}} \equiv \mathbf{e}_\alpha\left(\partial/\partial\left|\mathbf{n}\right|_\alpha\right)$. Тут $\mathbf{e}_\alpha$ – базисні вектори вибраної системи координат $\left(\alpha = \{x,y,z\}\right)$, а $\left|\mathbf{n}\right|_\alpha$ – проекції векторів кристалічної гратки на ці напрямки.

У застосуваннях найчастіше працюють у, так званому, континуальному наближенні [19], в якому обмежуються представленням:

$$\varphi_{f,\mathbf{n}\pm\mathbf{l}} = \varphi_f(\mathbf{n}) \pm \left(\mathbf{l}\cdot\nabla_{\mathbf{n}}\right)\varphi_f(\mathbf{n}) + (1/2)\left(\mathbf{l}\cdot\nabla_{\mathbf{n}}\right)^2\varphi_f(\mathbf{n}). \quad (10)$$

З точки зору розглянутих в роботі [19] наближень (які приводить до динамічних властивостей квазічастинки, ідентичних властивостям точкових релятивістських об'єктів) це буде ***четвертим наближенням***.

Після підстановки представлень (10) у підсистеми (8), (9) вони набувають вже вигляду рівнянь:

$$\hbar\left(\partial\varphi_f(\mathbf{n})/\partial t\right) + \sum_{\mathbf{l}(\neq 0)}\left|M_{\mathbf{l}}^f\right|\sin\left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}\right)\left(\mathbf{l}\cdot\nabla_{\mathbf{n}}\right)\varphi_f(\mathbf{n}) = 0 ; \quad (11)$$

$$(1/2)\sum_{\mathbf{l}(\neq 0)}\left|M_{\mathbf{l}}^f\right|\cos\left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}\right)\left(\mathbf{l}\cdot\nabla_{\mathbf{n}}\right)^2\varphi_f(\mathbf{n}) + G_f\varphi_f^3(\mathbf{n}) +$$
$$+\left(\sum_{\mathbf{l}(\neq 0)}\left|M_{\mathbf{l}}^f\right|\cos\left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}\right) + \hbar\left(\dot{\gamma}_f - \dot{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{n}\right)\right)\varphi_f(\mathbf{n}) = 0 . \quad (12)$$

Рівняння (11) – це однорідне лінійне диференціальне рівняння першого порядку у частинних похідних. Його розв'язок можна будувати у вигляді довільної функції від різницевих змінних $\left|\mathbf{n}\right|_\alpha - \nu_\alpha t$. Константа ν_α має розмірність швидкості і визначається безпосередньою підстановкою такого розв'язку у рівняння (11). Але перш ніж обговорювати цю систему далі, спростимо її за рахунок попередніх трьох наближень [19]. Перше з них – це наближення плоскої хвилі у фазі (воно вже використане). Друге – це наближення найближчих сусідів. В цьому наближенні у (11), (12) зберігаються тільки доданки, в яких $\mathbf{l}$ приймає три мінімальні значення, які співпадають з векторами гратки $\mathbf{b}_i$. І, нарешті, третє наближення – це наближенням кубічної гратки. У цьому наближенні умова прямокутності гратки $b_\alpha^i = \delta_{i\alpha}b_\alpha$ спрощується до такої: $b_\alpha^i = \delta_{i\alpha}b$. Після цих спрощень, у яких далі працюватимемо також і для інших видів нелінійностей, врешті матимемо для рівнянь (11), (12):

$$\left(\partial\varphi_f/\partial t\right) + C_f\sin\left(k_\alpha b\right)\left(\partial\varphi_f/\partial X_\alpha\right) = 0 ; \quad (13)$$

$$\left(\hbar^2/2m_f\right)\cos\left(k_\alpha b\right)\left(\partial^2\varphi_f/\partial X_\alpha^2\right) + G_f\varphi_f^3 +$$
$$+\left(m_f C_f^2\sum_\sigma\cos\left(k_\sigma b\right) + \hbar\left(\dot{\gamma}_f - \dot{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{R}\right)\right)\varphi_f = 0 . \quad (14)$$

Для зручності використання континуального наближення, у рівняннях (13), (14) використані тотожні перепозначення: $\mathbf{n} \equiv n_\alpha b \mathbf{e}_\alpha \equiv X_\alpha \mathbf{e}_\alpha \equiv b x_\alpha \mathbf{e}_\alpha \equiv \mathbf{R}$, з яких очевидно, що: $X_\alpha = b x_\alpha$. Змінна x_α надалі матиме сенс безрозмірного представлення змінної X_α і є компонентою вектора $\mathbf{r}$, який має зміст безрозмірного представлення вектора $\mathbf{R}$, тобто $\mathbf{R} \equiv b\mathbf{r}$. Використані також позначення для констант C_f та m_f [19], перша з яких має зміст максимальної швидкості квазічастинки:

$$C_f = (b/\hbar)|M_f|, \tag{15}$$

а друга має зміст скалярної маси:

$$m_f = \hbar^2 / \left(b^2 |M_f|\right). \tag{16}$$

При переході від (11), (12) до виразів (13), (14) (з врахуванням (15), (16)) також було перепозначено: $|M_b^f| \equiv |M_f|$. Ці наближення щодо кристалічної гратки дають змогу використати ще таке співвідношення: $|M_f| \equiv m_f C_f^2$, яке безпосередньо випливає з означень (15) та (16). Аналогічно до [19], рівняння (13), (14) можна привести до безрозмірного вигляду. Це можна зробити за рахунок додаткового (до просторових змінних) означення безрозмірного часу: $\tau = \left(|M_f|/\hbar\right)t$, а також безрозмірного хвильового імпульсу $\mathbf{p} = b\mathbf{k}$ $(p_\alpha = k_\alpha b)$. Можна також скористатися позначеннями для безрозмірної швидкості $\beta_\alpha = \sin(p_\alpha)$ та безрозмірної динамічної маси: $\mu_\alpha \equiv 1/\cos(p_\alpha)$ [19]. Тоді рівняння (13), (14) набувають вигляду:

$$\partial\varphi_f/\partial\tau + \beta_\alpha \cdot \left(\partial\varphi_f/\partial x_\alpha\right) = 0; \tag{17}$$

$$(1/2\mu_\alpha)\left(\partial^2\varphi_f/\partial x_\alpha^2\right) + g_f\varphi_f^3 + \left(\sum_\alpha 1/\mu_\alpha + \left(\dot{\gamma}_f - \dot{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{r}\right)\right)\varphi_f = 0. \tag{18}$$

У рівнянні (18) використане також позначення:

$$g_f = G_f/|M_f|. \tag{19}$$

Позначення $\dot{\gamma}_f$ та $\dot{\mathbf{p}}$ тепер означають похідні по безрозмірному часу τ.

Загальним розв'язком рівняння (17) відносно функції: φ_f, є довільна функція такої структури:

$$\varphi_f(\tau,\mathbf{r}) = \varphi_f\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(\tau)\right) \equiv \varphi_f\left(\left\{x_\alpha - x_0^{(\alpha)}(\tau)\right\}\right) \equiv \varphi_f\left(\{\xi_\alpha\}\right) \equiv \varphi_f(\boldsymbol{\xi}). \tag{20}$$

Вектор $\mathbf{r}_0(\tau)$ визначається динамічним рівнянням:

$$\dot{\mathbf{r}}_0 = \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}), \tag{21}$$

або в компонентах:

$$\dot{x}_0^{(\alpha)} = \beta_\alpha(p_\alpha) = \sin(p_\alpha), \tag{22}$$

і фактично має зміст рівняння траєкторії точки $\mathbf{r}_0$ в системі відліку кристала. При цьому вектор хвильового імпульсу $\mathbf{p}$ повинен бути означеним, як функція часу τ. Тоді рівняння (18) набуває вигляду нелінійного рівняння Шредінгера:

$$(1/2\mu_\alpha)\left(\partial^2\varphi_f/\partial\xi_\alpha^2\right) + g_f\varphi_f^3 - \dot{\mathbf{p}}\cdot\boldsymbol{\xi} + \left(\sum_\alpha 1/\mu_\alpha + \left(\dot{\gamma}_f - \dot{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{r}_0\right)\right)\varphi_f = 0, \tag{23}$$

сформульованого вже у власній системі відліку, пов'язаній з точкою $\mathbf{r}_0(\tau)$. Тут, поки що, не виникає ніяких підстав для використовування динамічної умови щодо імпульсу $\mathbf{p}$, відмінної від умови $\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{0}$, оскільки відсутні зовнішні впливи (поля). Інші умови у відсутності зовнішніх впливів можуть виникати, якщо відмовитись від наближення плоскої хвилі у фазі. В найпростішому випадку у розумінні континуального підходу вигляду (10) стосовно не тільки амплітуди φ_f, але й фази Γ_f [4, 18], у рівнянні (12) і, як наслідок, у рівнянні (23) виникатимуть доданки вигляду інтегрованої нелінійності. Таку нелінійність, у певних наближеннях, можна розглядати як дисипативні сили взаємодії збудження з граткою. Це і визначатиме умову $\dot{\mathbf{p}} \neq \mathbf{0}$ і відповідну цій умові нерівномірну динаміку типу гальмування (або прискорення, якщо є механізм відбору збудженням енергії у середовища кристалу).

Умова $\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{0}$ приведе рівняння (23) до вигляду:

$$(1/2\mu_\alpha)\left(\partial^2\varphi_f/\partial\xi_\alpha^2\right) + g_f\varphi_f^3 + \varepsilon_f\varphi_f = 0, \tag{24}$$

де позначено:

$$\varepsilon_f \equiv \Omega_f + \sum_\alpha 1/\mu_\alpha, \quad \Omega_f \equiv \dot{\gamma}_f. \tag{25}$$

При цьому ε_f відіграє роль власного значення рівняння (24), а Ω_f має зміст безрозмірного частотного фактора. На відміну від ε_f він є власним значенням всього збудженого стану кристалу. Умова $\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{0}$ приводить до того, що імпульс $\mathbf{p}$ є константою в часі. А, отже, динамічні умови (21), (22) можна привести до конкретного вигляду: $\mathbf{r}_0 = \boldsymbol{\beta}\tau$. Або в компонентах: $x_0^{(\alpha)} = \beta_\alpha\tau = \tau\sin(p_\alpha)$.

При постійному імпульсі рівняння (24) стає повністю стаціонарним завдяки постійності компонент вектора швидкості: $\beta_\alpha = \sin(p_\alpha)$, та тензора маси:

$$\mu_\alpha \equiv 1/\cos(p_\alpha) \equiv 1/\sqrt{1-\beta_\alpha^2}, \tag{26}$$

а також воно стає автоматично сумісним з рівнянням (17) та його розв'язком у вигляді (20).

Аналізу розв'язків стаціонарного рівняння (24) присвячено досить багато досліджень (наприклад, [2, 4, 6, 7, 10, 12, 14, 18÷20]). Тут будуть розглянуті лише головні аспекти цієї проблеми та деякі нові розв'язки. Вони логічно випливають з попередніх досліджень і їх аналіз буде корисним для інших видів нелінійності.

Оскільки тепер параметри рівняння (24) є константами, то, взагалі-то, його можна привести до вигляду:

$$(1/2)\Delta\varphi_f(\boldsymbol{\rho}) + g_f\varphi_f^3 + \varepsilon_f\varphi_f = 0, \tag{27}$$

простою заміною змінних:

$$\rho_\alpha = \xi_\alpha\sqrt{\mu_\alpha}, \tag{28}$$

де ρ_α – компоненти вектора $\boldsymbol{\rho} = \rho_\alpha\mathbf{e}_\alpha$, а $\Delta \equiv \sum_\alpha \partial^2/\partial\rho_\alpha^2$ – оператор Лапласа. Відомо, що аналітичних розв'язків рівняння (27) у центральносиметричному випадку, тобто коли: $\Delta = \partial^2/\partial\rho^2 + (2/\rho)(\partial/\partial\rho)$, де

$$\rho = \sqrt{\sum_\alpha \rho_\alpha^2}, \tag{29}$$

побудувати не можна. Це можна показати, застосовуючи методи теорії диференціальних рівнянь. Відомі тільки його числові та асимптотичні розв'язки [9, 16]. Але добре відомі [2] аналітичні розв'язки цього рівняння у одновимірному випадку, коли, наприклад: $\Delta \equiv \partial^2/\partial\rho_z^2$. Такі розв'язки називають солітонами і вони мають вигляд:

$$\varphi_f(\rho_z) = B_f/\mathrm{ch}(\lambda_f\rho_z). \tag{30}$$

Параметри B_f, λ_f визначаються прямою підстановкою цього розв'язку у рівняння (27) з врахуванням тотожності: $\Delta \equiv \partial^2/\partial\rho_z^2$. В результаті такої підстановки можна знайти: $\lambda_f^2 = -2\varepsilon_f$; $B_f^2 = -2\varepsilon_f/g_f$. Видно, що власне значення ε_f може бути тільки від'ємним: $\varepsilon_f = -|\varepsilon_f|$. Саме воно визначається вже умовою нормування: $N_f \equiv \sum_{\mathbf{n}} |a_{f\mathbf{n}}|^2$, яка у одновимірному випадку приймає такий конкретний вигляд:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_f^2(\rho_z)\, d\rho_z = N_f\sqrt{\mu_z}\,. \qquad (31)$$

Зазвичай покладають $N_f = 1$, а сама ця умова дає: $|\varepsilon_f| = (g_f^2/8)\mu_z$. Для B_f та λ_f відповідно матимемо остаточно: $B_f = (1/2)\sqrt{g_f\mu_z}$; $\lambda_f = (g_f/2)\sqrt{\mu_z}$.

Ці розв'язки настільки фізично привабливі, що завжди виникає спокуса якось використати їх і у випадках не одновимірних просторів, які визначаються загальним рівнянням (27). Зокрема, цьому рівнянню задовольняють наступні розв'язки: $\varphi_f(\boldsymbol{\rho}) = B_f/\mathrm{ch}(\lambda_f^x\rho_x + \lambda_f^y\rho_y + \lambda_f^z\rho_z)$. Ці розв'язки не мають просторової структури (є константами) у площинах: $\lambda_f^x\rho_x + \lambda_f^y\rho_y + \lambda_f^z\rho_z = \mathrm{constant}$, перпендикулярних до напрямку розповсюдження солітона. З іншого боку вони мають солітонну просторову конфігурацію у напрямку розповсюдження, тобто перпендикулярно до площин $\lambda_f^x\rho_x + \lambda_f^y\rho_y + \lambda_f^z\rho_z = \mathrm{constant}$. Не дивлячись на те, що ці розв'язки задовольняють рівнянню (27), вони все ж не можуть бути визнані фізичними у квантовому розумінні, оскільки не мають скінченої норми.

Для того, щоб продемонструвати це, можна, не обмежуючи загальності, дещо спростити задачу. А саме, розглянемо рух лише у z напрямку. Тоді: $p_x = p_y = 0$, $p_z \neq 0$; $\beta_x = \beta_y = 0$, $\beta_z = \sin(p_z)$; $\mu_x = \mu_y = 1$, $\mu_z \equiv 1/\cos(p_z) \equiv 1/\sqrt{1-\beta_z^2}$. Рівняння (24), при цьому, набуває вигляду:

$$\begin{aligned}&(1/2)\left(\partial^2\varphi_f/\partial\xi_x^2\right) + (1/2)\left(\partial^2\varphi_f/\partial\xi_y^2\right) + \\ &+ (1/2\mu_z)\left(\partial^2\varphi_f/\partial\xi_z^2\right) + g_f\varphi_f^3 + \varepsilon_f\varphi_f = 0\end{aligned}, \qquad (32)$$

Це рівняння, як видно, має аксіальну симетрію відносно осі z. Якщо тепер вважати, що шукана функція $\varphi_f(\boldsymbol{\xi})$ не залежить від компонент ξ_x, ξ_y вектора $\boldsymbol{\xi}$ (тобто, не має структури у напрямках, поперечних до напрямку руху), то розв'язок приймає вигляд (30). Різниця, полягає тільки в тому, що тепер розв'язок залежить від змінної ξ_z, а не від ρ_z. Але умова нормування (31) набуває тепер іншого вигляду:

$$\iiint_{(\infty)} \varphi_f^2(\xi_z)\, d\xi_x d\xi_y d\xi_z = N_f\,. \qquad (33)$$

Видно, що ліва частина цієї рівності розбіжна. Для забезпечення її збіжності треба обмежити інтегрування по компонентах ξ_x, ξ_y. При цьому, таке обмеження необхідно виконати так, щоб воно не суперечило рівнянню (32), хоча б приблизно. У загальному випадку не можна подати розв'язок нелінійного рівняння у вигляді співмножників. Наприклад, подати його у вигляді: $\varphi_f(\boldsymbol{\xi}) = H_f(\xi_\perp)\Phi_f(\xi_z)$, де $\xi_\perp = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}$. Але виявляється є фізично несуперечливий випадок, коли це можна зробити точно в термінах узагальнених функцій. Цей випадок відповідає спеціальному вибору множника $H_f(\xi_\perp)$ у вигляді узагальненої функції Хевісайда $H_f(\xi_\perp) = \theta_-(1-\lambda_f^\perp\xi_\perp)$. При цьому функція $H_f(\xi_\perp)$ має такі властивості: $H_f(\xi_\perp) = 1$, якщо $\lambda_f^\perp\xi_\perp \le 1$ і $H_f(\xi_\perp) = 0$, якщо $\lambda_f^\perp\xi_\perp > 1$. Параметр $\lambda_f^\perp$ є оберненим радіусом області, всередині якої функція $H_f(\xi_\perp)$ відмінна від нуля, а зовні цієї області вона рівна нулю. Проблема конкретного значення параметра $\lambda_f^\perp$ обговорювалась, наприклад, в [6]. Такий вибір множника $H_f(\xi_\perp)$ пов'язаний з двома важливими властивостями, а саме: $H_f^3(\xi_\perp) = H_f(\xi_\perp)$ та $\dfrac{\partial H_f}{\partial\xi_\perp} = 0$. Ці властивості формально забезпечують можливість розглядати представлення $\varphi_f(\boldsymbol{\xi}) = H_f(\xi_\perp)\Phi_f(\xi_z)$ як точний розв'язок рівняння (32), який має скінчену норму. Множник $\Phi_f(\xi_z)$, при цьому, визначається рівнянням:

$$\theta_-(1-\lambda_f^\perp\xi_\perp)\left\{(1/2\mu_z)\Phi_f''(\xi_z) + g_f\Phi_f^3 + \varepsilon_f\Phi_f\right\} = 0\,.$$

Це рівняння задовольняється тотожно зовні області $\xi_\perp = 1/\lambda_f^\perp$ (тобто при $\lambda_f^\perp\xi_\perp > 1$) за рахунок властивостей $\theta-$функції. Всередині цієї області (при $\lambda_f^\perp\xi_\perp \le 1$) воно задовольняється за рахунок диференціального рівняння: $(1/2\mu_z)\Phi_f''(\xi_z) + g_f\Phi_f^3 + \varepsilon_f\Phi_f = 0$, і створює розв'язки у вигляді (30): $\Phi_f(\xi_z) = B_f/\mathrm{ch}(\lambda_f\xi_z)$. Повний розв'язок: $\varphi_f(\boldsymbol{\xi}) = \theta_-(1-\lambda_f^\perp\xi_\perp)\Phi_f(\xi_z)$, з врахуванням умови нормування (33), але у вигляді: $\iiint_{(\infty)} \varphi_f^2(\boldsymbol{\xi})\, d\xi_x d\xi_y d\xi_z = 1$, зводиться до такого:

$$\begin{aligned}\varphi_f^2(\boldsymbol{\xi}) &= \mu_z\cdot\left(\left(\lambda_f^\perp\right)^4 g_f/4\pi\right)\times \\ &\times\theta_-(1-\xi_\perp\lambda_f^\perp)\cdot\mathrm{ch}^{-2}\left(\left(\left(\lambda_f^\perp\right)^2 g_f/2\sqrt{\pi}\right)\mu_z\xi_z\right).\end{aligned}$$

Тут приведено квадрат розв'язку, оскільки саме він має фізичний зміст і називається солітоном.

Зразу звертають на себе увагу дві обставини. По-перше, добуток $\mu_z\xi_z$ в аргументі функції $\mathrm{ch}^{-2}(...)$, при врахуванні явного вигляду співмножників ($\mu_z = 1/\sqrt{1-\beta_z^2}$, $\xi_z \equiv z - z_0(\tau)$, де $z_0(\tau) = \beta_z\tau$), набуває такого явного вигляду: $\mu_z\xi_z \equiv (z-\beta_z\tau)/\sqrt{1-\beta_z^2}$. Тобто, має Лоренц-інваріантну форму у динамічному напрямку. По-друге, весь фактор $\varphi_f^2(\boldsymbol{\xi})$ пропорційний параметру g_f. За означенням (19) цей параметр обернено пропорційний матричному елементу $|M_f|$. В свою чергу, матричний елемент $|M_f|$, за означенням (16), обернено пропорційний "масі спокою" квазічастинки m_f. Тобто, функція $\varphi_f^2(\boldsymbol{\xi})$, врешті, виявляється пропорційною масі m_f. Це було б не так важливо, але функція $\varphi_f^2(\boldsymbol{\xi})$, відповідно до (2), приводить до появи кривизни у просторі кристалічної гратки (у околі точки $z_0(\tau) = \beta_z\tau$ локалізації збудження). Тобто, формально це виглядає так, якби маса квазічастинки створювала викривлення простору кристала. Можна також прийняти до уваги, що функція $\varphi_f^2(\boldsymbol{\xi})$ пропорційна компоненті безрозмірної динамічної

маси μ_z. У цьому випадку функція $\varphi_f^2(\boldsymbol{\xi})$ буде пропорційною компоненті повної динамічної маси, яка визначається добутком $\mu_z m_f$.

Власне значення ε_f, яке фігурує у рівняннях (24), (27), (32) і рівняннях, аналогічних до них, набуває вигляду: $\varepsilon_f = -\left(\mu_z g_f^2 \left(\lambda_f^{\perp}\right)^4 / 8\pi\right)$. Якщо тепер ввести позначення: $\sigma_f \equiv \left(g_f^2 \left(\lambda_f^{\perp}\right)^4 / 8\pi\right)$, то загальне власне значення, означене тотожностями (25), можна представити у більш компактному вигляді:

$$\Omega_f(p_z) = -2 - 1/\mu_z - \sigma_f \mu_z \equiv -2 - \cos(p_z) - \sigma_f / \cos(p_z).$$

За допомогою цього співвідношення можна вже означувати і динамічні властивості [19] квазічастинки. У наближенні $\sigma_f << 1$ можна показати [6], що повна хвильова функція (7) розглядуваного збудження матиме вигляд модульованої за амплітудою плоскої хвилі:

$$a_{fn}(t) \Rightarrow a_f(\tau, \mathbf{r}) = \varphi_f(\xi_{\perp}, \xi_z) \cdot \exp\left[i\left(p_z z - \Omega_f(p_z)\tau\right)\right] \equiv$$
$$\equiv \frac{\left(\lambda_f^{\perp}\right)^2 \sqrt{g_f}}{2\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\theta_-\left(1 - \xi_{\perp}\lambda_f^{\perp}\right)}{\sqrt[4]{1-\beta_z^2}} \times \tag{34}$$
$$\times \frac{\exp\left(ip_z\left(z - \beta_z\tau\right)\right)}{\mathrm{ch}\left(\sqrt{2\sigma_f}\left(z - \beta_z\tau\right)/\sqrt{1-\beta_z^2}\right)} \cdot \exp(iS) \cdot \exp(i2\tau).$$

Тут змінна ξ_z записана у явному вигляді: $\xi_z = z - \beta_z\tau$, а дія S означена як добуток: $S = I\tau$, оскільки розглядається вільний рух. Лагранжіан I, з точністю до фактора σ_f, визначається виразом [6]: $I(\beta_z) = \beta_z \arcsin(\beta_z) + \sqrt{1-\beta_z^2}$, а з врахуванням фактора σ_f ускладнюється до такого: $I(\beta_z) = \beta_z \arcsin(\beta_z)\left(1 - \frac{\sigma_f}{1-\beta_z^2}\right) + \sqrt{1-\beta_z^2}\left(1 + \frac{\sigma_f}{1-\beta_z^2}\right)$. Цей лагранжіан описує динаміку класичного типу по відношенню до канонічно-спряженої пари змінних: хвильового імпульсу p_z та точки локалізації збудження: $z_0(\tau) = \beta_z\tau$. Квантова частина розв'язку, яка визначається множником: $\exp\left(ip_z\left(z - \beta_z\tau\right)\right) \Big/ \mathrm{ch}\left(\sqrt{2\sigma_f} \cdot \frac{z - \beta_z\tau}{\sqrt{1-\beta_z^2}}\right)$, сформульована у власній системі відліку відносно точки $z_0(\tau) = \beta_z\tau$. Виявляється, що розв'язок (34) має ще одну цікаву властивість. Йдеться про корпускулярно-хвильову дуальність, яка явно присутня у розв'язку (34). Дійсно, хвильова функція (34) являє собою модульовану за амплітудою плоску хвилю. Характер модуляції має частинковоподібну форму, яку називають солітоном. Точніше солітоном називають квадрат цього множника. Видно, що цей солітон рівномірно переміщується в просторі незалежно від "поведінки" фазової частини розв'язку та без затухання, а також задовольняє умові лоренцевої інваріантності. Залежно від співвідношення між параметрами g_f і $\lambda_f^{\perp}$ це збудження може мати неперервний набір просторових форм [6]: від сплюснутого еліпсоїда обертання (вздовж динамічного напрямку z) до витягнутого. Зрозуміло, що можна знайти і такі умови, при яких збудження матиме майже сферичну форму.

Але на фоні всіх перерахованих привабливих рис розглянутого аксіально-симетричного розв'язку, він має один недолік. Недолік полягає у фактичній відсутності залежності розв'язку від змінної $\xi_{\perp} = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}$ у напрямку, поперечному до динамічного. Це обумовлено використанням тета-функції. Її використання, як елемента хвильової функції, саме по собі, не викликає ніяких заперечень. Але вона не може забезпечити адекватного описання кривизни простору кристалу у всіх напрямках.

Тому далі обговорюватимуться можливості побудови центрально-симетричних розв'язків в умовах більш загальних типів нелінійності, ніж кубічна. При цьому, тета-функція використовуватиметься лише як фактор, що забезпечує виключно скінченність норми, а не властивості самої хвильової функції.

4. Солітонні збудження в твердих тілах. Загальна нелінійність п'ятого ступеню

Тепер розглянемо ситуацію, коли при розкладанні функції $G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)$ у степеневий ряд враховується наступний за $\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)^2 \equiv \left|a_{fn}\right|^4$ доданок, якщо сама ця функція не має якої-небудь симетрії. Тоді повинно мати місце представлення: $G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right) = -\left[\left(G_f^{(1)}/2\right)\left|a_{fn}\right|^4 + \left(G_f^{(2)}/3\right)\left|a_{fn}\right|^6\right]$. Виконуючи далі послідовність перетворень, аналогічну до виконаної між формулами (3) ÷ (27), можна отримати рівняння: $(1/2)\Delta\varphi_f(\boldsymbol{\rho}) + g_f^{(2)}\varphi_f^5 + g_f^{(1)}\varphi_f^3 + \varepsilon_f\varphi_f = 0$. Параметри $g_f^{(1)}$, $g_f^{(2)}$ означені аналогічно до параметра g_f, приведеного у (19). Компоненти вектора $\boldsymbol{\rho}$, згідно (28), означені низкою рівностей: $\rho_\alpha \equiv \xi_\alpha\sqrt{\mu_\alpha} \equiv \left(x_\alpha - \beta_\alpha\tau\right)\sqrt{\mu_\alpha}$. У центральносиметричному випадку це рівняння набуває вигляду:

$$(1/2)\left(\partial^2\varphi_f/\partial\rho^2\right) + (1/\rho)\left(\partial\varphi_f/\partial\rho\right) + g_f^{(2)}\varphi_f^5 + g_f^{(1)}\varphi_f^3 + \varepsilon_f\varphi_f = 0. \tag{35}$$

Згідно (29) $\rho \equiv \sqrt{\sum_\alpha \rho_\alpha^2}$. Деякі аспекти розглядуваного типу нелінійності аналізувалися у роботі [20]. Там, зокрема показано, що у просторово-одновимірному випадку рівняння (35) теж має розв'язки, обернено пропорційні до гіперболічного косинусу. Але одночасно можна знайти також і розв'язки, що виражаються через степеневі функції. Саме ці розв'язки будуть розглянуті тут, але більш детально.

Отже, розв'язок рівняння (35) шукається у вигляді:

$$\varphi_f(\rho) = B_f \Big/ \sqrt{1 + \lambda_f\rho^2}. \tag{36}$$

Підставляючи (36) у (35), можна знайти умови, при яких рівняння (35) задовольняється тотожно:

$$g_f^{(1)} = 0; \quad \varepsilon_f = 0; \quad B_f^4 = \left(3\lambda_f \Big/ 2g_f^{(2)}\right). \tag{37}$$

Перша з приведених умов констатує той факт, що розв'язок (36) задовольняє рівнянню (35) лише у випадку, коли кубічна нелінійність відсутня у рівнянні (35). Згідно теорії диференціальних рівнянь, вимоги на параметри рівняння означають, що відповідна підстановка не є розв'язком. Але у даному разі це може означати також і те, що при розкладанні функції $G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)$ в ряд по степенях $\left|a_{fn}\right|^2$ таке розкладання починається з доданку: $-\left(G_f^{(2)}/3\right)\left|a_{fn}\right|^6$. В свою чергу це означає, що функція $G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)$ повинна мати непарну симетрію. Далі працюватимемо в рамках саме такого припущення.

Друга умова у (37) ($\varepsilon_f = 0$) означає, що власне значення всього збудженого стану кристалу Ω_f, згідно (25), (26), має вигляд: $\Omega_f = -\sum_\alpha 1/\mu_\alpha \equiv -\sum_\alpha \cos(p_\alpha)$ і точно відповідає власному значенню для вільного руху об'єкта класичного типу [6,7,19], тобто квазічастинці.

І, нарешті, третя умова у (37): $B_f^4 = \left(3\lambda_f / 2g_f^{(2)}\right)$, пов'язує невідомі параметри B_f та λ_f, залишаючи вільним тільки один з них. Розв'язок (36) тепер набуває вигляду:

$$\varphi_f(\rho) = \left(3\lambda_f / 2g_f^{(2)}\right)^{1/4} \Big/ \sqrt{1+\lambda_f\rho^2}\,. \qquad (38)$$

Наявність вільного параметра λ_f дає можливість ставити питання не тільки про скінченність норми для цього розв'язку, але й про її рівність одиниці. Використання цього розв'язку в умові нормування (31), яка набуває вигляду: $\int_0^\infty \varphi_f^2(\rho)\rho^2 d\rho = N_f\sqrt{\mu_x\mu_y\mu_z}/4\pi$, відразу демонструє проблему. Вона полягає в тому, що інтеграл у лівій частині останньої рівності розбіжний на верхній границі. Щоб позбутися цієї проблеми можна, як і у розділі 3, розширити розв'язок тета-множником. Тобто, будувати розв'язок у вигляді: $\varphi_f(\rho) = \theta_-(\rho_{ns}-\rho)\Phi_f(\rho)$. Підстановка цього у (35) приводить до рівняння: $\theta_-(\rho_{ns}-\rho)\Big[(1/2)\left(\partial^2\Phi_f(\rho)/\partial\rho^2\right) + (1/\rho)\left(\partial\Phi_f(\rho)/\partial\rho\right) + g_f^{(2)}\Phi_f^5 + g_f^{(1)}\Phi_f^3 + \varepsilon_f\Phi_f\Big] = 0$. В області $\rho > \rho_{ns}$ ліва його частина тотожно рівна нулю за рахунок тета-множника. У області $\rho \le \rho_{ns}$ останнє рівняння зводиться до вигляду (35) відносно функції $\Phi_f(\rho)$. Параметр ρ_{ns}, на відміну від аналогічного параметра $1/\lambda_f^\perp$ розділу 3, може бути визначений однозначно. Наприклад, він може бути визначений умовою перевищення сигналу (який, зазвичай, пропорційний функції $\varphi_f^2(\rho)$) над деяким шумовим рівнем δ. У даному розгляді це може бути умова перевищення зміни постійних кристалічної гратки, над рівнем амплітуди її теплових або нульових коливань. Така зміна є наслідком збудження і визначається однією з рівностей (2). Отже, така умова зводиться до вигляду: $\varphi_f^2(\rho) \ge \delta$, і дозволяє визначити ρ_{ns}. Нерівність $\varphi_f^2(\rho) \ge \delta$ вимагає також виконання умови: $\left(3\lambda_f / 2g_f^{(2)}\right)^{1/2} >> \delta$.

Проаналізована у цьому розділі ситуація має наступні особливості. По-перше, знайдено сферично-симетричний аналітичний розв'язок нелінійного рівняння Шредінгера з загальною нелінійністю п'ятого ступеню (НРШ3+5). Він має асимптотику: $\varphi_f(\rho) \Rightarrow 1/\rho$, при $\rho \to \infty$, де ρ означене у (29). По-друге, динамічні властивості розглядуваного збудження, які визначаються власним значенням Ω_f, тотожні вільній релятивістські частинці [19]. По-третє, отримані розв'язки можуть мати зміст амплітуди квантово-механічної хвильової функції, оскільки мають скінчену норму.

В той же час асимптотика $\varphi_f(\rho) \Rightarrow 1/\rho$ не є повністю задовільною, оскільки фізичний зміст в багатьох випадках має функція $\varphi_f^2(\rho)$. Крім того, було показано, що "НРШ3+5" у сферично-симетричному випадку завжди зводиться до "НРШ5+…", відсікаючи всі симетрії для функції $G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)$, крім непарної. Це дає підстави розглядати далі загальну нелінійність дев'ятого ступеню (НРШ5+9), яка, для непарної функції $G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)$, є наступною за щойно розглянуту.

5. Солітонні збудження в твердих тілах. Загальна нелінійність дев'ятого ступеню

Для непарної функції $G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)$, має місце представлення: $G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right) = -\left[\left(G_f^{(1)}/2\right)\left|a_{fn}\right|^6 + \left(G_f^{(2)}/3\right)\left|a_{fn}\right|^{10}\right]$. Знаки у цьому розкладанні також вибрані з міркувань від'ємності фактору $G_f\left(\left|a_{fn}\right|^2\right)$. Далі можна отримати рівняння, аналогічне до (35):

$$(1/2)\left(\partial^2\varphi_f/\partial\rho^2\right) + (1/\rho)\left(\partial\varphi_f/\partial\rho\right) + g_f^{(2)}\varphi_f^9 + g_f^{(1)}\varphi_f^5 + \varepsilon_f\varphi_f = 0\,.$$

Цьому рівнянню задовольняє розв'язок, аналогічний до (36):

$$\varphi_f(\rho) = \theta_-(\rho_{ns}-\rho)B_f \Big/ \left(1+\lambda_f\rho^2\right)^{1/4}\,. \qquad (39)$$

Тут зразу враховано розширення за рахунок тета-множника. В результаті у області $\rho \le \rho_{ns}$ отримаємо співвідношення, аналогічні до (37):

$$\varepsilon_f = 0\,;\quad B_f^4 = \left(5g_f^{(1)}/g_f^{(2)}\right);\quad \lambda_f = \left(40\left(g_f^{(1)}\right)^2 / g_f^{(2)}\right). \qquad (40)$$

Ці співвідношення відрізняються від (37) тим, що параметри B_f та λ_f детерміновані. Тому в умові нормування, яка тут матиме вигляд: $N_f = \left(4\pi/\sqrt{\mu_x\mu_y\mu_z}\right)\int_0^{\rho_{ns}} \varphi_f^2(\rho)\rho^2 d\rho$, вже не можна покладати $N_f = 1$. Параметр N_f тепер цією умовою визначається. Ефективний радіус збудження ρ_{ns}, так же, як і у попередньому розділі, визначається умовою $\varphi_f^2(\rho_{ns}) = \delta$. Він теж є детермінованою величиною.

Фізичні особливості цього розв'язку такі. По-перше, він теж сферично симетричний. Але він має іншу, ніж у попередньому випадку, асимптотику: $\varphi_f^2(\rho) \Rightarrow 1/\rho$, при $\rho \to \infty$. Цей результат заслуговує на увагу, оскільки у застосуваннях, як уже відмічалося, функція $\varphi_f^2(\rho)$ в багатьох випадках визначає просторовий розподіл фізичних характеристик збудженого кристалу. Зокрема, вона визначає потенціал інжектованого у кристал заряду. Як відомо, всі фізично цікаві потенціали мають саме таку асимптотику. При такій інтерпретації функції $\varphi_f^2(\rho)$ радіальна компонента оператора градієнта: $\partial\varphi_f^2/\partial\rho$, визначає радіальну компоненту напруженості відповідного поля. При детальному аналізі виявиться, що похідна $\partial\varphi_f^2/\partial\rho$ обернено пропорційна матричному елементу $\left|M_f\right|$. А отже, згідно (16), вона пропорційна масі m_f. У розділі 3, нагадаємо, маса була пропорційна квадрату хвильової функції, а не похідній. Динамічні властивості, які визначаються власним значенням Ω_f, теж тотожні вільній релятивістській частинці. Отримані розв'язки можуть також мати квантовий зміст, так як мають скінчену (але не рівну 1) норму. Повний розв'язок, аналогічний до (34), визначається співвідношенням:

$$a_{fn}(t) \Rightarrow a_f(\tau,\mathbf{r}) = \varphi_f(\rho)\exp\left[i\left(p_\alpha x_\alpha - \Omega_f\tau\right)\right] \equiv$$
$$\equiv B_f\frac{\theta_-(\rho_{ns}-\rho)\exp\left(ip_\alpha\rho_\alpha/\mu_\alpha\right)}{\left(1+\lambda_f\rho^2\right)^{1/4}}\exp(iS).$$

Дія S означена рівністю: $S = I(\boldsymbol{\beta})\tau$, у якій: $I(\boldsymbol{\beta}) = \sum_\alpha\left(\beta_\alpha\arcsin(\beta_\alpha) + \sqrt{1-\beta_\alpha^2}\right)$ [19].

6. Висновки

В роботі проаналізовані збуджені стани матеріалів із структурою кристалів (маються на увазі, головним чином, збудження електронної підсистеми, але результати можуть бути прямо застосовані до будь-якої фізичної системи з дисперсіями $E_f(\mathbf{k})$ або $\omega_f(\mathbf{k})$). Однак, на відміну від [19], суттєво враховувалась реакція кристалічної гратки на збудження. Оскільки врахування взаємодії гратки із збудженням приводить до нелінійних рівнянь Шредінгера, то розглянуто декілька можливих варіантів нелінійностей, відмінних від кубічної. Проаналізована можливість побудови аналітичних сферично-симетричних розв'язків із скінченою нормою. Відповідні розв'язки знайдено. Всі вони розглядалися так, щоб квантове описання збудження було сформульоване у власній системі відліку відносно точки умовної локалізації збудження. Динамічні властивості збудження (квазічастинки) практично тотожні динаміці вільної релятивістської частинки, детально аналізованої в [19]. Отримані розв'язки демонструють виражену корпускулярно-хвильову дуальність. Дійсно, вони являють собою модульовану за амплітудою плоску хвилю. При цьому характер амплітудної модуляції має форму, подібну до частинки. Квадрат цієї амплітуди називають солітоном. Цей солітон рівномірно переміщується в просторі незалежно від "поведінки" фазової частини розв'язку та без затухання. Важливою особливістю отриманих розв'язків є те, що їх амплітуди (або квадрати амплітуд) мають степеневу асимптотику типу $1/\rho$ при $\rho \to \infty$.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Гайдідей Ю.Б.* Зв'язані стани двох допованих носіїв, зумовлені спіновим зв'язком у антиферо-магнетиках / Ю.Б. Гайдідей, В.М. Локтєв // УФЖ. – 2005. – Т. 50. № 4. – С. 400.
2. *Давыдов А.С.* Солитоны в квазиодномерных молекулярных структурах / А.С. Давыдов // УФН. – 1982. – Т. 38, № 4. – С. 603.
3. *Давыдов А.С.* Теория твердого тела / А.С. Давыдов – М.: Наука. 1976. – 640 с.
4. *Ляшко І.І.* Про вплив початкової форми збудження на формування солітона в одновимірному молекулярному ланцюгу / І.І. Ляшко, О.Е. Гріщенко, А.М. Федорченко, А.Д. Супрун // Доповіді АН УРСР. – 1985. – Сер. А, № 10. – С. 52.
5. *Пекар С.И.* Кристоллооптика и добавочные световые волны / С.И.Пекар. – К.: Наукова думка. 1982. – 287 с.
6. *Супрун А.Д.* Динамічні властивості одноелектронних нелінійних збуджень кристалів / А.Д. Супрун. – К.: ВПЦ "Київський університет" 2008. 151 с.
7. *Супрун А.Д.* Модель физического вакуума с локальной трансляционной симметрией / А.Д. Супрун // Вестник Киевского ун-та. Физика. – 1986. – Вып. 27. – С. 18.
8. *Шукла К.П.* Нелинейные аспекты квантовой физики плазмы / К.П. Шукла, Б. Элиассон // УФН. – 2010. – Т. 180, № 1. – С. 55.
9. *Chiao R.Y.* Self-trapping of optical beams / R.Y. Chiao, E. Garmire, C.H. Townes // Phys. Rev. Let. 1964. – V.13, No 15. – P. 479.
10. *Davydov A.S.* Solitons in Molecular Systems / A.S. Davydov. / Kluwer Academic Publishers. – 1991. – 419 p.
11. *Gaididei Yu.B.* On a Theory of the Electronic Spectrum and Magnetic Properties of High-Tc Superconductors / Gaididei Yu.B., Loktev V.M. // Physica Status Solidi (b). – 1998. – V. 147, № 1. – P. 307.
12. *Kosevich A.M.* Bloch oscillations of magnetic solitons as an example of dynamical localization of quasiparticles in a uniform external field. / A.M. Kosevich // Low Temp. Phys. 2001. – V. 27, № 7. – P. 513.
13. *Mryglod I.M., Kuporov V.M.* Perturbation Theory for Collective Modes in the Dynamics of Simple and Complex Liquids / I.M. Mryglod, V.M. Kuporov // Ukr. J. Phys. – 2010. – V. 55, № 11. – P.1 172.
14. *Natanzon Y.* Dynamics of a self-trapped quasiparticle in a one-dimensional molecular lattice with two phonon modes. / Y. Natanzon, L.S. Brizhik, A.A. Eremko // Physica Status Solidi (b). – 2007. – V. 244, № 2. – P. 545.
15. *Charge* transmission through a molecular wire: The role of terminal sites for the current-voltage behavior / E.G. Petrov, Ya.R. Zelinskyy, V. May, P. Hänggi // J. Chem. Phys. – 2007. – V. 127, № 8. – 084709.
16. *Scott A.C.* Dynamics of Davydov solitons / A.C. Scott // Phys. Rev. A. – 1982. – V. 26, № 1. – P. 578.
17. *Shukla K.P.* Colloquium: Fundamentals of dust-plasma interactions / K.P. Shukla, B. Eliasson // Rev. Mod. Phys. – 2009. – V. 81, № 1. – P. 24.
18. *Suprun A.D.* 2-Soliton Excitation in an Infinite molecular chain. Theor / A.D. Suprun // Math. Phys. 1983. – V. 57, № 2. – P. 1141.
19. *Suprun A.D., Shmeleva L.V.* Degeneracy effect of dynamical properties of quasi-particles of electronic origin in semiconductor materials / A.D. Suprun, L.V. Shmeleva // Functional materials. – 2012. – V. 19, № 4. – P. 508.
20. *Suprun A.D.* Two types of soliton solutions of Schroedinger equation with the total nonlinearity of 5th degre / A.D. Suprun // Functional Materials. – 2001. – V. 8. № 3. – P. 436.

Надійшла до редколегії 15.09.13

А. Супрун, канд. физ.-мат. наук,
Л. Шмельова, канд. физ.-мат. наук,
КНУ имени Тараса Шевченко, Киев

ЦЕНТРАЛЬНО СИММЕТРИЧНЫЕ СОЛИТОНЫ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Получены аналитические решения в виде центральносимметрических солитонов для нелинейных уравнений Шредингера с различными вариантами нелинейности. Показано, что динамические свойства возбуждения тождественны динамике не автолокализованой квазичастички, тоесть динамике свободной релятивистской частички. Важной особенностью полученых решений есть то, что их амплитуды (или квадратыамплитуд) имеют степенную асимптотику в безконечно отдаленной точке.

Ключевые слова: центральносимметричные солитоны, электронные возбуждения, авто локализованые квазичастички.

A. Suprun, Dr. Sci. (Phys.-math),
L. Shmeleva, Dr. Sci. (Phys.-math),
National Taras Shevchenko University of Kiev

THE CENTRALLY SYMMETRIC SOLITONS FOR ELECTRONIC EXCITATIONS OF SOLIDS

The analytical solutions in the form of centrally symmetric solitons for nonlinear Schrödinger equations with various nonlinearities are received. It is shown, that dynamic properties of excitation are identical to dynamics of not self-trapped quasiparticle, i.e. identical to the dynamics of the free relativistic particle. The important feature of the received solutions is that their amplitudes (or squares of amplitudes) have power asymptotics in infinitely far point.

Keywords: centrally symmetric solitons, electronic excitations, self-trapped quasiparticle.

УДК: 538.9+544.7+608.1+663.18+681.2+579.6+346.7+338.28+338.45

А. Шірінян, д-р фіз.-мат. наук., доц.,
В. Макара, д-р фіз.-мат. наук., проф.
Київський національний університет імені Тараса Шевченка

КОНЦЕПЦІЯ СТВОРЕННЯ І РОЗВИТКУ НАНОІНДУСТРІЇ В УКРАЇНІ

Обговорюються проблемні питання нанотехнологій та суспільства і розроблено Концепція створення і розвитку наноіндустрії в Україні. Пропонується багаторівнева структура національної нанотехнологічної мережі, де управління і координація дій здійснюється учасником вищого рівня, відповідальним і головним розпорядником коштів – Державним агентством з питань науки, інновацій та інформатизації.

Ключові слова: проблемні питання нанотехнологій, інновації та інформатизація.

1. Вступ

Якщо не висловлено протилежних думок,
то немає з чого вибирати найкраще
Геродот Галікарнаський
(490–425 до н.е.)
давньогрецький історик, вчений-мандрівник

Слова з префіксом "нано" поступово стають звичними. Під нанотехнологіями розуміють сукупність методів оброблення, виробництва і застосування наноструктур і нанопристроїв і відповідних систем за допомогою контролю форми, розміру і властивостей з метою використання у тій чи іншій галузі господарства [1–2]. Нанонаука досліджує поведінку наномасштабних речовин на атомовому, одномолекулярному і багатомолекулярному рівнях, що виконуються з тією метою, щоб зрозуміти і скористатися властивостями таких речовин. Нанотехнології впливатимуть на нашу економіку і суспільство в найближчі 20 років, і закріпляться надовго завдяки подальшим науковим відкриттям і технологічним досягненням [2–3]. Особливість наноматеріалів полягає в тому, що речовини набувають нових і унікальних фізико-хімічних властивостей, коли їх розмір стає нанометричним [4–9].

З того часу як нобелевський лауреат з фізики Ричард Фейнман у 1959 році оголосив ідею того, що для атомів і елементарних частинок "внизу повним-повнісінько місця" ("there's plenty of room at the bottom"), пройшло майже 40 років. За цей час більшість розвинених країн світу ініціювали програми, які привели до появи інноваційних технологій в галузі фізико-хімічного матеріалознавства, що використовують і моделюють нові речовини на наномасштабному, атомарному і молекулярному рівнях [10].

Сьогодні в основному всі потужні дослідження в галузі точних наук підтримуються іноземними науковими фондами (CRDF, NATO, FP7, HORIZON2020, DFG, DAAD тощо). Питома вага нових знань, які втілюються в товарах, технологіях, освіті, організації виробництва в розвинених країнах світу, становить від 70 до 85 % їхнього ВВП [3]. На вітчизняному ринку ця цифра коливається лише в межах від 1 до 2 % ВВП. Такий стан справ в Україні й некерований розвиток може призвести до занепаду науково-технічного потенціалу та науково-технологічної бази секторів науки, зниження якості освіти, підвищення ресурсомісткості кінцевої продукції, відсутності представництва на світових ринках, а, в кінцевому рахунку, до втрати економічної незалежності. Все це зумовлює потребу порушення питання про створення національних центрів нанотехнологій світового рівня, національних технопарків і наукових парків, які б надали можливість швидкої реалізації інноваційних рішень у науці, техніці та галузях господарювання.

Разом з технологічним і економічним потенціалом нанотехнологій виникають нові специфічні ризики [2, 11–14]. Актуальність питань ризиків нанотехнологій визначається не тільки необхідністю використання, а й знаходженням способів виявлення, управління ризиками і убезпечення.

Наразі існує потреба у розв'язанні проблеми низької конкурентоспроможності вітчизняної промисловості на законодавчому рівні, що зумовлено відсутністю в Україні широко спектру високотехнологічних розробок світового рівня. Саме тому ми пропонуємо двоетапний підхід і відповідний законопроект. На першому етапі пропонується здійснити підготовчі заходи у 2015–2020 роках. На другом етапі пропонується створення наноіндустрії в Україні продовж 2020–2030 років. Такий часовий поділ і відповідна часова перспектива є важливими факторами для успішної реалізації проекту.

Статтю побудовано так, що розділи 2–5 є допоміжними, а розділ 6 є основним. У розділі 2 обговорюється сценарій появи штучних наномасшабних систем, у розділі 3 розкрито вплив нанотехнологій на появу нових ризиків. Розділ 3 присвячений питанням створення національного агентства наноматеріалів і наукового парку Київського національного університету імені Тараса Шевченка, розділ 5 – організаційним діям для створення і розвитку вітчизняної наноіндустрії. Розділ 6 деталізує пропозицію стосовно Концепції створення і розвитку наноіндустрії в Україні.

2. Сьогодення і майбутнє нанотехнологій

Хто раніше оволодіє нанотехнологіями,
той посяде провідне місце у техносфері майбутнього.
Едвард Теллер
(Edward Teller, 1908–2003)
американський фізик, керівник робіт
з створення водневої бомби в США

У нашому щоденному житті ми оточені нанорозмірними частинками: на міських вулицях може бути близько 50000 наночастинок у см^3, діаметр молекули ДНК – 2 нм, розмір віруса – 100 нм. З погляду походження розрізняють штучні і природні наносистеми і наночастинки. У дев'ятому столітті використовували наночастинки золота так, що речі переливалися різними кольорами [14]. Початком сучасного етапу масштабного освоєння наноматеріалів можна вважати 1991 рік, коли в США запрацювала перша нанотехнологічна програма Національного наукового фонду і 1997 рік, коли в Європі на державному рівні почалася підтримка таких досліджень [15–16].

За прогнозами найбільш важливими нанотехнологічними напрямами розробок, які впливатимуть на всі галузі життєдіяльності, є: 1) Енергетика; 2) Сільське господарство; 3) Водоочищення; 4) Діагностика захворювань і трансплантати в медицині; 5) Системи доставляння медикаментів, контроль за протіканням захворювань і виявлення шкідливих організмів; 6) Технології виробництва і зберігання харчових продуктів; 7) Усунення забруднення повіт-

© Шірінян А., Макара В., 2014

ря; 8) Будівництво; 9) Контроль нанооб'єктами за станом макросистеми; 10) Космос, 11) Спортивні і хімічні вироби, 12) Технології запису інформації на носії, 13) Захисні покриття для високої міцності виробів і від окиснення [17].

Наразі в світі стають актуальними технології отримання атомарних конструкторів і програмувальної матерії, які умовно поділяються на два підходи: "зверху-вниз" (up-down), що базуються в основному на фізичних методах і "знизу-вверх" (bottom-up), що більшою частиною оперують хімічними методами [1–2]. У першому випадку фізичного синтезу більш крупні фізичні об'єкти роздрібнюють до нанорозмірів, у другому випадку хімічного синтезу оперують молекулами для потрібного з'єднання у наноматеріал, що дає змогу контролювати властивості і дизайн нанооб'єкту.

Систематизація даних дає змогу прогнозувати сценарій появи нанопристроїв у житті людей по роках [2, 17]. Залежно від одержаних досягнень етапи переглядаються і наразі мають таку прогнозовану послідовність:

1. До 2020 року – перше покоління (пасивних) наноструктур.
2. Після 2020 року – друге покоління (активних) наноструктур.
3. Після 2030 року – третє покоління наноприладів і наноматеріалів, що інтегровані у великі наносистеми (включаючи кероване мультишкальне самозбирання і хіміко-механічне перероблення на рівні маркомолекул).
4. Після 2040 року – великі наносистеми 4-го покоління (подібні до живих систем гетерогенні молекулярні наносистеми, в яких кожна молекула в наносистемі матиме специфічну структуру і гратиме окрему роль).
5. Починаючи з 2050 – нанороботехніка, направляючі вузли і різні будови.

Найбільша кількість нанотехнологічних компаній знаходиться в США. Приблизно половина таких компаній діє за схемою науково-дослідних і проектно-конструкторських робіт. Виходячи з фінансових вкладень і темпів зростання ринків споживання, можна оцінити прогнозований розділ світового ринку нанотехнологій до 2020 року між провідними країнами і союзами: США – 40–45 % ринку, Японія – 25–30 % ринку, Європа – 15–20 % ринку, Азія – 5–10 % [2, 16].

3. Вплив нанотехнологій на появу нових ризиків

Сьогодні для більшості людей
"нанотехнології" – це така ж абстракція
як і ядерні технології в 30-і роки минулого століття
(витяг з Послання Президента Російської Федерації
Федеральним Зборам у 2007 році)

Наночастинки можуть потрапити в організм людини і тварин через дихальні шляхи, шкіру, кровоносну систему та їжу. Виявляється, що після попадання в організм розповсюдження наночастинок в тілі залежить від їх складу, розміру і властивостей поверхневих атомів [18]. Випробування на рибах і пацюках показали, що наночастинки можуть накопичуватися в мозку і печінці і збільшувати імунний опір організму [19–20]. Вплив наноречовин на навколишнє середовище і на людське здоров'я оцінюють за показниками токсичності, стійкості і біологічного накопичення.

Щодо промислових компаній, які пов'язані з нанотехнологіями і виробництвом, новими видами ризиків можуть бути:

- ризик виробництва, пов'язаний із збутом продукції, при створенні якої використовувалися нанотехнології;
- ризики, пов'язані із захистом інтелектуальної власності;
- ризики, пов'язані з недоторканністю приватного життя (мініатюрні сенсори можуть використовуватися як пристрої стеження);
- екологічний ризик від попадання наночастинок в навколишнє середовище;
- ризик ураження працівників підприємства, що використовує наночастинки;
- ризик ураження споживачів товарів, що містять наночастинки.

Все вищенаведене доводить необхідність подальших наукових досліджень впливу нанотехнологій на людину і суспільство. Саме тому, на наш погляд, доцільним є створення в Україні уповноважених національних науково-дослідних центрів медицини нанотехнологій, центрів охорони навколишнього середовища і ризиків нанотехнологій, які матимуть статус центрів колективного користування національного рівня.

З появою названих нових видів ризиків і можливістю оцінки відповідного збитку з'явиться необхідність в страхуванні нанотехнологій, як об'єкту страхового захисту [14, 21]. Можна припустити появу нанострахування як виду цивільно-правових відносин щодо захисту майнових й особистих інтересів застрахованих фізичних і юридичних осіб у разі настання страхових випадків, які включають страхування нанотехнологій і об'єктів страхового захисту, пов'язаних з наночастинками і наносистемами і об'єктів, властивості і поведінка яких обумовлена властивостями, структурою і поведінкою наносистем, що впливають на них. Оскільки нанотехнології носять інноваційний і перспективний характер і через 20 років вони проникнуть майже у всі області індустрії, можна чекати, що ризики нанотехнологій найближчим часом входитимуть в перелік страхових ризиків.

4. Національне агентство наноматеріалів і Науковий парк

Що неможливо виміряти, тим неможливо керувати.
Джон Френсіс "Джек" Уэлч-молодший
(John Francis "Jack" Welch Jr.)
американський бізнесмен,
колишній директор компанії "General Electric"

Нещодавно уряди України і сусідніх країн СНД задекларували про готовність у найближчі роки будувати міжнародний науково-дослідний центр наноматеріалів колективного користування в м. Дубна (Росія). Це безумовно важливий позитивний крок, який потребує обговорення у науковому суспільстві і можливої підтримки з боку української влади. Водночас ми наголошуємо на національних пріоритетах і першочергової необхідності створення на території України сучасного національного науково-технологічного агентства наноматеріалів [22]. До того, послуги зарубіжних науково-технологічних центрів є недоступними для українських вчених, наукових лабораторій і науково-виробничих компаній, а наявні центри колективного користування в Україні з унікальним обладнанням є нескоординованими і в умовах відсутності фінансування не знаходять реалізації для вітчизняних фахівців (а для закордонних спеціалістів є не цікавими).

Національне науково-технологічне агентство наноматеріалів. У попередніх працях авторів було запропоновано створення центру колективного користування унікальним обладнанням у галузі фізико-хімічного матеріалознавства – Національного науково-технологічного агентства наноматеріалів (далі ННТАН),

яке може стати сполучною ланкою між суб'єктами наукомісткого ринку [22]. Видається за доцільне створення ННТАН на базі існуючих провідних науково-технічних центрів і оновлених обладнанням навчально-наукових закладів, які позитивно зарекомендували себе, є визнаними у світі. Згідно з пропозицією, координація дій щодо створення ННТАН має бути з боку Кабінету міністрів, Державного агентства з питань науки, інновацій та інформатизації, Національної академії наук і Міністерства освіти і науки, молоді і спорту. ННТАН повинен мати статус національного центру, що дасть змогу створити умови для виникнення комерційних компаній подібно до того, як це відбувається в країнах-лідерах нанотехнологій США, Японії, Німеччині, Великобританії. Метою створення головної національної організації ННТАН є консолідація зусиль на зовнішньому і внутрішньому ринках з формування нанотехнологічної сітки України для дослідження і створення нових наноматеріалів для наноіндустрії країни.

Науковий парк Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Науковий парк являє собою форму організації науково-інноваційного процесу, яка сприяє швидкої комерціалізації високотехнологічних і наукомістких розробок і утворюється у вигляді науково-виробничого комплексу, до якого входять науково-дослідні центри і виробнича зона, де розташовані наукоємні фірми. З розвитком сучасних засобів комунікації стає можливим поява географічно віддалених і так званих "віртуальних" об'єднань як самостійних кластерів.

В Україні означення "наукового парку" унормоване як юридичної особи, що створюється з ініціативи вищого навчального закладу та/або наукової установи шляхом об'єднання внесків засновників для організації, координації, контролю процесу розроблення і виконання проектів наукового парку [23].

Можна виокремити два основних етапи розвитку "наукових парків" в світі: перший етап у 60-і роки, коли вони виникли переважно в США, і другий етап у 80-і роки, коли стали формуватися технопарки у США і Західній Європі, Японії та інших країнах. Розрізняють три основні моделі "наукового парку" – американська (США, Великобританія), японська (Японія) та змішана (Франція, ФРН) [24]. Наразі оцінки показують, що в світі вже функціонують понад 500 потужних технопаркових установ.

В Україні у 50-х роках минулого століття був заснований науковий парк інформаційних технологій на околиці Києва в урочищі Феофанія, який на той час створив достатню кількість інноваційних продуктів і отримав визнання. У незалежній Україні першу спробу залучення українських науковців і підприємців до участі у наукових програмах і проектно-конструкторській діяльності та стимулювання досліджень у технічних галузях було здійснено у 1999 році, коли були створені технологічні парки: "Напівпровідникові технології і матеріали, оптоелектроніка і сенсорна техніка", "Інститут електрозварювання імені Е. Патона" (м. Київ), "Інститут монокристалів" (м. Харків) [25–26].

У 2006 році згідно з Законом України № 523-V "Про Науковий парк "Київська політехніка"" від 22 грудня 2006 року було створено науковий парк на базі освітнього закладу НТУ "Київський політехнічний інститут" [27–28], директором якого став ректор освітнього закладу.

У 2010 році було створено "Науковий парк Київського національного університету імені Тараса Шевченка", засновниками якого є юридичні особи НАНУ і МОНмолодьспорту України, що розташовані в Києві [29]. Президентом Наукового парку є ректор Губерський Л. В., генеральним директором – професор Макара В.А.

У останні два роки швидко поширюється хвиля створення наукових парків в кожній області України. Серед останніх подій можна назвати Науковий парк "Наукоград-Харків", що був створений у 2012 році [30].

Важливими факторами успіху економічної діяльності Наукового парку є його місце розташування, наявність ключових осіб-установ для стимулювання його діяльності та інфраструктури для їх розвитку, розуміння наукового співтовариства принципів діяльності наукового парку, наявність стратегічного плану розвитку парку. Всі ці фактори досить вдало поєднані в "Науковому парку Київського університету імені Тараса Шевченка" (далі Науковий парк), оскільки Київський університет імені Тараса Шевченка:

1) має дослідницькі лабораторії, які можуть бути досить швидко переобладнані для потреб Наукового парку,

2) активно співпрацює з науковими установами різних країн,

3) має штат високопрофесійних наукових співробітників, які можуть брати участь у роботі парку та займатися підготовкою кадрів,

4) професійно готує достатню кількість молодих спеціалістів і має студентську молодь з високим рівнем якості знань,

5) являє собою державну форму власності з можливістю взаємодії з організаціями будь-якої форми власності,

6) має налагоджені професійні контакти з ключовими особами регулювання науково-організаційної діяльності в країни.

Враховуючи такі обставини можна припустити високу імовірність успішної реалізації Наукового парку в майбутньому.

Основні принципи діяльності Наукового парку Київського університету імені Тараса Шевченка розкрито в положеннях його статуту [29], де за основу було обрано Закон України 2006 року "Про наукові парки" [23].

Науковий парк було створено з метою поєднання можливостей освіти, науки, виробництва і бізнесу шляхом координації виконання інноваційних проектів Наукового парку його Учасниками та партнерами, керуючись бажанням прискорити розробку, впровадження і виробництво наукоємної конкурентоспроможної високотехнологічної продукції і спрямувати взаємоузгодженні дії на задоволення потреб внутрішнього ринку і нарощування експортного потенціалу України.

Предметом діяльності Наукового парку є:

- здійснення досліджень у перспективних напрямках розвитку світової наукової думки;
- організаційне удосконалення інноваційної діяльності та комерційного трансферу науково-технічних розробок;
- утворення навчальних кластерів, коледжів, інститутів підвищення кваліфікації, інших навчальних закладів, заснування юридичних осіб, що провадять діяльність відповідно до напрямів діяльності Наукового парку;
- координація і взаємне погодження дій засновників/партнерів Наукового парку для ефективного та раціонального використання наявного наукового потенціалу, матеріально-технічної бази для комерціалізації результатів наукових досліджень і їх впровадження на вітчизняному та закордонному ринках;
- залучення внутрішніх та іноземних інвестицій для вирішення задач, що стоять перед Науковим парком;
- підготовка, навчання та перекваліфікація спеціалістів різних освітньо-кваліфікаційних рівнів, науково-педагогічних і наукових кадрів як з відривом, так і без відриву від виробництва на платній та інших умовах, які формуються потребами Наукового парку та інвестиційною політикою держави;

➢ підготовка, навчання та перекваліфікація фахівців та представників різних іноземних держав за міжнародними договорами, контрактами з юридичними та фізичними особами, якщо це не входить у протиріччя міжнародним договорам України;

➢ створення сприятливих умов становлення та розвитку малих і середніх інноваційних підприємств, що працюють в науково-технічному середовищі, в тому числі шляхом організації бізнес-інкубатора в межах Наукового парку;

➢ організація промислового випуску та широкого використання інноваційних продуктів Наукового парку.

Учасниками Наукового парку можуть бути наукові, проектно-конструкторські, технологічні і впроваджувальні організації, промислові підприємства, комерційні структури та інші організації з будь-якою формою власності, чия діяльність відповідає пріоритетним напрямам Наукового парку та які підписали статут, установчий договір, виконують його вимоги та зареєстровані у встановленому порядку.

Наразі діяльність Наукового парку розпочато, але ще потребують вирішення організаційні питання унормування офіційної символіки Наукового парку і налагодження зв'язків з подібними організаціями для формування національної нанотехнологічної мережі установ і співпраці.

5. Організаційні дії для створення і розвитку вітчизняної наноіндустрії

Якщо ми взялися за нову справу,
ми повинні інакше думати і діяти
Авраам Лінкольн
(Abraham Lincoln, 1809–1865)
16-й президент США, визволитель американських рабів

Більшість розвинених країн світу вже ініціювали національні програми у галузі нанотехнологій [22, 31]. Останньою програмою в ЕС стала стратегічна програма "Горізонт 2020" (HORIZON2020) [32]. На теренах СНД Україна була ініціатором "Угоди про створення загального науково-технологічного простору держав-учасників Співдружності Незалежних Держав" (із змінами і доповненнями від 2009 р.), яка так і не набрала чинності [33]. У 2011 році було проголошено про "Міждержавну програму інноваційного співробітництва держав-учасників СНД на період до 2020 року", яку підписали Вірменія, Білорусія, Казахстан, Киргизстан, Молдова, Російська Федерація, Таджикистан і Україна [34]. Керує програмою російське агентство "Россотрудничество" – федеральне агентство по справах СНД, співвітчизників, що мешкають закордоном, і по міжнародному гуманітарному співробітництву. Показовим є те, що основним оператором програми є російський фонд "Сколково", а само Агентство підпорядковується Міністерству іноземних справ Російської Федерації. Основним розробником з української сторони виступає Інститут економіки і прогнозування НАНУ, а головним замовником цієї програми є Міністерство економічного розвитку і торгівлі України.

Заслуговує на увагу те, що останніми роками країни східного регіону Китай, Індія та інші країни Азії розробили і успішно використовують принцип копіювання і модифікації нових розробок інших "know-how" для швидкого входження на ринок і пропозицій. Це так званий принцип "me-too product" (перекладається як "я теж продукт"), коли вартість такого дещо модифікованого продукту є набагато меншою початкового оригінального "know-how" продукту, що має високовартісний захист патентами і технологіями, а зовнішній вигляд і основні функціональні властивості "me-too product" майже не відрізняються від "know-how" продукту. Зазвичай вартість "me-too product" в 2–5 разів є меншою за оригінальну версію, що стимулює його швидкий продаж. Саме такий підхід дав змогу Китаю, Індії, багатьом країнам Азії останніми роками обходити патентний захист шляхом невеликих модифікацій інноваційного продукту і стати потужними гравцями на ринках науково-інноваційних товарів і послуг.

Видається за доцільне активне використання названого принципу в Україні на початкових етапах інноваційного впровадження нових розробок для того, щоб швидко стати країною з розвиненими технологіями і запропонувати широкий спектр продуктів "me-too product" на світових ринках. Для цього Україна має достатню кількість науково-дослідних інститутів, науково-освітніх центрів на рівні з найбільшими країнами світу. Крім того, існують визнані у світі вітчизняні наукові школи та унікальні технології, які ще не втратили актуальності щодо практичного застосування. Потенціал для успішної швидкої реалізації підходу "me-too product" є достатнім, потрібен ефективно діючий науково-виробничий зв'язок.

Для наступного етапу впровадження новітніх технологій у виробництво потрібним стає ґрунтовний підхід, який дасть змогу реалізації науково-інноваційного розвитку економіки країни і суттєвого покращення рівня життя громадян. На нашу думку, формування національної наноіндустрії може стати найважливішим пріоритетним стратегічним напрямом, що визначить нові підходи до перетворення вітчизняної промисловості. З цих позицій ми розробили і пропонуємо комплекс підготовчих заходів та інструментів зі створення вітчизняної наноіндустрії й управління ризиками нанотехнологій [2].

Підготовчі заходи. Комплекс заходів з створення вітчизняної наноіндустрії передбачає попередню підготовчу роботу в 2015–2020 роках і базується на таких діях:

1. Організаційні заходи, що включають:

➢ формування на приоритетній основі списку першочергових пріоритетних напрямів досліджень у сфері нанотехнологій в Україні, які можуть бути ефективно і у досить короткий час розвинуті вітчизняними фахівцями;

➢ розробка плану першочергових заходів, підготовка кошторисної вартості можливих витрат і робіт, чіткий календарний план за етапами робіт, перелік необхідного нового матеріально-технічного обладнання;

➢ створення національного науково-технологічного агентства наноматеріалів;

➢ створення національного науково-дослідного центру медицини нанотехнологій;

➢ створення національного науково-дослідного центру охорони навколишнього середовища і ризиків нанотехнологій;

➢ створення центрів колективного користування унікальним устаткуванням, щоб в будь-якому регіоні можна було знайти дослідницьку установку світового рівня, з можливістю використання устаткування у дослідженнях будь-якою успішною/визнаною групою вітчизняних фахівців, будь-якої навчально-наукової установи;

➢ розробка системи ефективного контролю виконання конкретних заходів, плану формування національної нанотехнологічної мережі установ.

2. Технічні заходи, що включають:

➢ створення та оновлення технопарку країни за рахунок закупівель на ринках вітчизняного і зарубіжного устаткування, і за рахунок розробки і створення нового дослідно-технологічного і метрологічного устаткування;

➢ оснащення вищих навчальних закладів, що беруть участь в підготовці наукових і науково-педагогічних кадрів

для високотехнологічних секторів економіки в галузі нанотехнологій сучасним спеціальним науково-технологічним устаткуванням колективного користування;

➢ ведення суворого контролю за технологічним режимом дослідження і виробництва наноматеріалів;

➢ розробка способів утилізації нанотехнологічної продукції при припиненні або відсутності збуту.

3. Кадрові заходи:

➢ відкриття нових спеціальностей та спеціалізації в галузі нанонаук у навчально-наукових установах країни з метою підготовки нового покоління фахівців, що володіють знаннями і уміннями в нових галузях науки і техніки;

➢ забезпечення безперервного освітнього циклу в галузі нанотехнологій;

➢ виконання робіт з метою адаптації вітчизняних учених і фахівців в галузі наноіндустрії до відповідного наукоємкісного устаткування, що купується;

➢ проведення навчання і підвищення кваліфікації і перепідготовки на виробництві персоналу, що буде здійснювати експлуатацію об'єктів нанотехнологій.

4. Інформаційно-аналітичні заходи:

➢ створення системи збору і аналізу інформації, необхідної для аналізу світових і вітчизняних досягнень і ризиків нанотехнологій та оптимального управління ними;

➢ створення матеріально-технічної бази і відповідного кваліфікованого персоналу;

➢ інформування населення щодо нових нанотехнологій і ризиків нанотехнологій;

➢ моніторинг науково-технічного, виробничого і ринкового потенціалу, аналіз технологічної готовності впровадження нанотехнологій.

5. Договірно-правові заходи:

➢ розробка системи управління власністю;

➢ розробка національної системи забезпечення єдності вимірювань, системи стандартизації і оцінки відповідності в галузі нанотехнологій і наноматеріалів, гармонізовану з міжнародними стандартами;

➢ підготовка нових видів договорів, страхових полісів і юридичних документів, які б забезпечували умови для створення і розвитку наноіндустрії в Україні та оптимальний розподіл ризиків між учасниками ринку нанотехнологій.

6. Фінансові заходи:

➢ створення спеціального фонду розвитку нанотехнологій, колективних резервних фондів учасників ринку нанотехнологій і учасників ринку страхування.

7. Політичні заходи:

➢ створення системи інститутів приватно-державного партнерства;

➢ розробка системи аналізу і стимулювання попиту на продукцію наноіндустрії, спеціалізованої державної програми підтримки бізнесу в сфері нанотехнологій;

➢ створення системи підтримки експорту продукції наноіндустрії;

➢ контроль міжнародних контрактів з боку держави для того, щоб були дотримані гарантії учасників країн, де нанотехнології дали потужний імпульс розвитку країни і де відбулися страхові випадки або де нанотехнології призвели до катастрофічних результатів і негативних екологічних наслідків.

Додержання цих умов створить гарантії потрібні для того, щоб вітчизняний ринок нанотехнологій був ефективно створений. Для наступної ефективної реалізації вищенаведений заходів потрібна державна програма — Концепція створення і розвитку наноіндустрії України на 2020–2030 рр. [35–37].

6. Концепція створення і розвитку наноіндустрії в Україні на 2020–2030 роки

Ті, хто стоїть на чолі великих справ
зустрічають не менше перешкод у власній партії,
ніж з боку своїх супротивників.
Жан-Франсуа́ Поль де Гонді
(Jean François Paul de Gondi, cardinal de Retz, 1613–1679),
архієпископ Паризький, французький кардинал і політик

Унормований порядок представлення законопроекту потребує розкриття змісту і методів досягнення відповідних цілей, що відображається в пунктах положень Концепції: анотації, невирішених проблем, базових термінів, мети, завдань, шляхів реалізації, переліку і функціональних дій основних учасників, питань управління і контролю, очікуваних результатів і нормативних документів, інструментів реалізації і фінансовому забезпеченні. Розглянемо послідовно кожний пункт.

Анотація. Анотація охоплює найменування, перелік розробників, відповідальних осіб, термін реалізації, цілі та завдання, розкриття очікуваних результатів та фінансового забезпечення. Таку інформацію приведено в таблиці 1.

Проблеми, на розв'язання яких спрямована Концепція. Україна суттєво відстає від світових нанотехнологічних лідерів – США, Японії, країн Євросоюзу за виробництвом і використанням наномасштабних систем і наноматеріалів. Водночас Україна має достатню кількість науково-дослідних інститутів, науково-освітніх центрів на рівні з найбільшими країнами світу. Крім того існують визнані у світі вітчизняні наукові школи та унікальні технології у галузях розробки нових матеріалів. Останні поступово втрачають актуальності щодо практичного застосування, устаткування застаріває. В Україні сьогодні недостатня координація робіт, що проводяться державою, в галузі досліджень властивостей, поведінки і отримання наноматеріалів. Існуючі в країні центрі колективного користування не реалізовані повною мірою і за відсутності фінансування науково-дослідних робіт залишаються недоступними для потенційних користувачів. Сьогодні переважно всі потужні дослідження підтримуються іноземними науковими фондами. Ситуація змінюється досить швидко не на користь України. Більшість вітчизняних спеціалізованих конференцій і виставок має локальний характер, відсутня частка українського представництва на зарубіжних конференціях і виставках, присвячених нанотехнологіям. Відсутнє фінансування складних наукоємних проектів на основі державно - приватного партнерства і технопарків.

Специфічна особливість нанотехнологій полягає у міжгалузевому характері: одне і те саме явище може бути використане в різних галузях. Міждисциплінарний характер нанотехнологій, різна термінологія у дослідженнях, технологіях і вимірювальних методах призводять до певної роз'єднаності, ускладнення успішного обміну технічною інформацією.

Основною проблемою, на розв'язання якої направлена Концепція є низький рівень конкурентоспроможності економіки Україні на світовому рівні. У зв'язку з цим потрібна державна програма, яка буде направлена на створення і розвиток високотехнологічної і конкурентноспроможної української наноіндустрії.

Основним завданням створення і розвитку наноіндустрії в України є забезпечення ринку власною науково-технологічною продукцією і економічна безпека. Саме тому Концепція направлена на концентрацію і координацію ресурсів для формування комплексу науково-виробничих, освітніх і фінансових організацій різних форм власності, що здійснюють діяльність по створенню національних конкурентних переваг на світовому

ринку, промислової наукоємної продукції, сучасного науково-технічного потенціалу України.

Створення і розвиток наноіндустрії в Україні, швидке освоєння інноваційних результатів промисловістю можливі тільки за наявності сприятливих умов і державної підтримки у фінансовій, організаційній, кадровій, нормативно-правовій сферах. Формування національної наноіндустрії повинно стати найважливішим пріоритетним стратегічним завданням, що визначає нові підходи до перетворення вітчизняної промисловості.

Базові терміни, які використані в Концепції, є такі: наносистема, наночастинка, нанонаука, нанотехнології, наноіндустрія, Національноє науково-технологічне агентство наноматеріалів, Національний науково-дослідний центр медицини нанотехнологій, Національний науково-дослідний центр охорони навколишнього середовища і ризиків нанотехнологій, нанотехнологічна продукція, Державне агентство з питань науки, інновацій та інформатизації, національна нанотехнологічна мережа, національна нанотехнологічна система, наностраховання.

Наносистема, наночастинка – система, що містить структурні елементи розміром близько 0,1–100 нм, які визначають її основні властивості і характеристики в цілому. До наносистем відносяться, зокрема, нанопристрої і наноматеріали.

Нанонаука – це галузь досліджень поведінки речовин на атомному, одномолекулярному і багатомолекулярному рівнях, що проводяться з метою розуміння і використання унікальних властивостей наноматеріалів.

Таблиця 1

Анотація Концепції створення і розвитку наноіндустрії в Україні на 2020–2030 роки

Найменування	Концепція створення і розвитку наноіндустрії в Україні на 2020–2030 роки
Розробники	Шірінян Арам Сергійович, Макара Володимир Арсенійович
Відповідальний керівник – координатор	Голова Державного агентства з питань науки, інновацій та інформатизації
Співкоординатори – відповідальні виконавці, реалізатори	з економічних питань, метрології та стандартизації – міністр економічного розвитку і торгівлі
	з фінансових питань – міністр фінансів
	з питань охорони навколишнього середовища – міністр екології та природних ресурсів
	з наукових питань – президент НАНУ
	з науково-освітніх питань і питань інтелектуальної власності – міністр освіти і науки, молоді та спорту
	з питань медицини нанотехнологій і охорони здоров'я – міністр охорони здоров'я
	з питань виробництва продукції – міністр промислової політики
Термін реалізації	2020–2030 роки
Цілі	створення високотехнологічної і конкурентноспроможної української наноіндустрії
	формування умов для виробництва нових видів продукції вітчизняної наноіндустрії і виходу на світовий ринок високих технологій
	створення конкурентноспроможного сектора досліджень і розробок в галузі наноіндустрії і формування інфраструктури наноіндустрії України
Головні Завдання	створення сприятливих умов для конкурентноспроможних розробок, нанотехнологій і комерційних видів нанотехнологічної продукції
	створення інфраструктури національної нанотехнологічної мережі
	формування інфраструктури системи забезпечення єдності вимірювань, стандартизації, оцінки відповідності і безпеки в галузі нанотехнологій
	формування умов для створення і розвитку системи підготовки кадрів в галузі наноіндустрії
Очікувані результати	використання вітчизняних нанотехнологій у ключових галузях науки і техніки, промисловому виробництві
	вихід на світовий ринок високих технологій
	створення й дослідження нового покоління наноматеріалів і нанотехнологій
	створення національної нанотехнологічної мережі
Фінансове забезпечення	кошти державного і місцевих бюджетів
	інвестиції підприємств та організацій
	гранти міжнародних організацій і фізичних осіб

Нанотехнології – це сукупність методів обробки, виробництво і застосування наноструктур, нанопристроїв і наносистем із заданими властивостями і характеристиками за допомогою контролю форми, розміру і властивостей наносистем з метою використання у тій або іншій галузі господарства.

Наноіндустрія – інтегрований міжгалузевий і міждисциплінарний науково-промисловий і фінансово-економічний комплекс підприємств різних форм власності, що забезпечують і здійснюють цілеспрямовану розробку, дослідження і комерціалізацію нанотехнологій.

Національне науково-технологічне агентство наноматеріалів – національний центр колективного користування унікальним обладнанням у галузі сучасного матеріалознавства, який стане сполучною ланкою між суб'єктами наукомісткого ринку. ННТАН стане головною організацією, яка разом з провідними галузевими науково-освітніми центрами створить нанотехнологічну мережу країни.

Національний науково-дослідний центр медицини нанотехнологій – спеціалізований центр колективного користування унікальним обладнанням в галузі сучасної медицини, на базі якого будуть вивчатися потенційні загрози у сфері життєдіяльності людини, пов'язані з розвитком і розповсюдженням нанотехнологій; здійснюватимуться аналіз і контроль впливу нанотехнологій на людину і тварини; виконуватимуться інші дослідження в галузі медицини нанотехнологій.

Національний науково-дослідний центр охорони навколишнього середовища і ризиків нанотехнологій – спеціалізований центр, на базі якого будуть вивчатися потенційні загрози для навколишнього середовища, пов'язані з розвитком і розповсюдженням нанотехнологій; встановлюватимуться критерії і рівні безпеки нанооб'єктів, наноматеріалів і іншої нанотехнологічної продукції; здійснюватимуться аналіз і контроль впливу нанотехнологій на рослини і навколишнє середовище.

Нанотехнологічна продукція – створені за допомогою нанотехнологій товари, роботи, послуги, пов'язані з наночастинками і наносистемами, і об'єкти, властивості і поведінка яких обумовлена властивостями, структурою і поведінкою наносистем, що впливають на них.

Державне агентство з питань науки, інновацій та інформатизації – дорадчий орган виконавчої влади, що діє постійно, утворений з метою забезпечення взаємодії органів виконавчої влади з представниками підприємницького співтовариства і науковою громадськістю по виробленню пропозицій по реалізації державної політики в галузі інноваційних технологій, наноіндустрії і науково-інноваційного розвитку.

Національна нанотехнологічна мережа (ННТМ) – сукупність підприємств різних організаційно-правових форм, що забезпечують і здійснюють скоординовану кооперативну розробку і комерціалізацію нанотехнологій, проведення фундаментальних і прикладних досліджень, підготовку кадрів, розвиток інфраструктури наноіндустрії, організацію виробництва і безпосереднє виробництво нанотехнологічної продукції.

Національна нанотехнологічна система – це сукупність законодавчих, структурних і функціональних інституцій, які задіяні у процесі створення та застосування наукових знань та нанотехнологій, національної нанотехнологічної мережі, визначають правові, економічні, організаційні та соціальні умови науково-технологічного прогресу в Україні та забезпечують створення високотехнологічної і конкурентоспроможної вітчизняної наноіндустрії.

Нанострахування – страхування нанотехнологій і об'єктів страхового захисту, пов'язаних з наночастинками і наносистемами, і об'єктів, властивості і поведінка яких обумовлена властивостями, структурою і поведінкою наносистем.

Сформулюємо послідовно загальні положення, мету, основні напрями, завдання та шляхи реалізації Концепції.

Загальні положення. Концепція створення та розвитку наноіндустрії в Україні на 2020–2030 роки визначає основні засади і напрями створення і розвитку національної нанотехнологічної системи і спрямована на досягнення стратегічних інтересів та конкурентоспроможності Україні на міжнародному ринку нанотехнологій.

Концепція є інструментом реалізації державної політики у сфері нанотехнологій щодо координації діяльності державних і приватних органів та підприємств різних форм власності, установ і організацій, пов'язаної з розробкою, використанням і виробництвом наноматеріалів в Україні.

Концепція визначає стратегію створення та розвитку наноіндустрії Україні, проблеми нанотехнологій і шляхи їх розв'язання, принципи забезпечення комплексного розвитку наноіндустрії. Концепція базується на використанні новітніх технологій і властивостей наноматеріалів, які відповідатимуть міжнародним стандартам, враховує необхідність забезпечення конкурентоспроможності вітчизняних організацій.

Мета. Стратегічною метою Концепції є створення конкурентноспроможної як на внутрішньому, так й на зовнішньому ринках високотехнологічної української наноіндустрії, економічна незалежність держави і підвищення якості життя населення України.

Основні (приоритетні) напрями. Створення та розвиток наноіндустрії повинні здійснюватися за такими напрямами, що надалі називаються основними напрямами Концепції:

1. Фундаментальні дослідження нанооб'єктів і наносистем.
2. Розробка нових наноматеріалів.
3. Розробка конструкційних і композитних наноматеріалів.
4. Розробка функціональних наносистем.
5. Наноелектроніка, нанофотоніка і наномагнетизм.
6. Наноінженерія.
7. Нанобіотехнології і наноматеріали медичного призначення.
8. Вплив наноматеріалів на організм людини і тварин.
9. Вплив наноматеріалів на рослини і навколишнє середовище.
10. Розробка нанотехнологій для виробництва, промисловості, енергетики.
11. Розробка нанотехнологій для систем безпеки.
12. Виробництво нанотехнологічної продукції.
13. Промисловий синтез молекул лікарських засобів і фармакологічних нанопрепаратів.
14. Метрологія і стандартизація у сфері наноіндустрії.
15. Вплив нанотехнологій на зміни в суспільстві [38–51].

Обрані основні напрями включають:

- дослідження, направлені на отримання нових, необхідних для розробки основ перспективних нанотехнологій, знань про властивості і поведінку нанооб'єктів і наносистем;
- розробку нових технологій створення і застосування конструкційних і функціональних наноматеріалів, наночастинок, нанотрубок і нановолокнини, нанодисперсій (колоїдів), нанокристалів і нанокластерів, наноструктурних плівок і покриття;
- вивчення наноматеріалів і прогнозування їх властивостей;
- цілеспрямовану розробку наноматеріалів із заданими властивостями і характеристиками;
- цілеспрямовану розробку функціональних наносистем із заданими властивостями і характеристиками, вивчення і прогнозування властивостей таких наносистем;
- вивчення впливу наноматеріалів на організм людини, тварин і на рослини;
- синтез нових лікарських засобів і фармакологічних нанопрепаратів;
- розробку нових технологій створення і застосування систем з використанням наноматеріалів;
- виробництво та контроль нанотехнологічної продукції;
- уніфікацію термінології, регламентування методики проведення вимірювань і випробувань;
- встановлення критерії відповідності, якості і безпеки нанооб'єктів, наноматеріалів та іншої нанотехнологічної продукції;
- дослідження впливу нанотехнологій на якість життя в Україні, умови праці та відпочинку, соціальні стандарти.

Завдання Концепції. Розв'язання існуючих проблем передбачається шляхом комплексного та системного виконання наступних завдань:

- створення сприятливих умов для конкурентноспроможних розробок, нанотехнологій і комерційних видів нанотехнологічної продукції,
- створення інфраструктури національної нанотехнологічної мережі,
- формування умов для створення і розвитку системи підготовки кадрів в галузі наноіндустрії
- формування сучасної інфраструктури системи забезпечення єдності вимірювань, стандартизації, оцінки відповідності і безпеки в галузі нанотехнологій.

Шляхи реалізації Концепції включають такі кроки:

- формування пріоритетного списку напрямів досліджень у сфері нанотехнологій;
- розвиток досліджень і розробок, що забезпечують створення нових конкурентноспроможних нанотехнологій;
- створення сучасної інфраструктури національної нанотехнологічної мережі (ННТМ) із забезпеченням її організацій устаткуванням світового рівня;

➢ колективний доступ в установленому порядку всіх учасників ННТМ до її складових;

➢ створення і розвиток кадрового потенціалу наноіндустрії;

➢ сприяння інноваційній спрямованості сучасної системи освіти;

➢ формування інформаційно-аналітичної і методичної системи, забезпечення прогнозування науково-технологічного розвитку;

➢ забезпечення системи фінансово-кредитної підтримки реалізації конкурентоспроможних нанотехнологічних програм і підтримка перспективних проектів з високим потенціалом комерціалізації і міжнародної конкурентоспроможності;

➢ реалізація перспективних проектів в провідних галузях науки і техніки, ресурсо- і енергозбереженні, промисловому виробництві, охороні здоров'я і виробництві продуктів харчування, обороноздатності і безпеки держави;

➢ створення системи сприяння просуванню продукції наноіндустрії на внутрішньому і зовнішньому ринках високотехнологічної продукції;

➢ збільшення обсягів виробництва і продажів вітчизняної продукції наноіндустрії на зовнішніх і внутрішньому ринках;

➢ забезпечення процесу розширеного відтворення нових знань через організацію національної нанотехнологічної системи з взаємодією учасників ННТМ, державних і приватних компаній;

➢ активна участь в міжнародній науково-технічній кооперації у сфері наноіндустрії;

➢ забезпечення присутності і закріплення конкурентних позицій на ринках наноіндустрії інших держав;

➢ створення умов для українських транснаціональних корпорацій у сфері наноіндустрії;

➢ аналіз і контроль впливу нанотехнологій на людину, тварин, рослини і соціальні зміни в суспільстві, макроекономічну стабільність і ефективність ринку праці;

➢ створення і розвиток необхідної нормативно-правової бази;

➢ контроль і регулювання безпеки розробки, виробництва і використання нанопродуктів;

➢ управління інтелектуальною власністю, метрологія, стандартизація в галузі нанотехнологій.

Перейдемо до обговорення інфраструктури наноіндустрії, національної нанотехнологічної мережі, функціональних дій основних учасників Концепції.

Національна нанотехнологічна мережа. Інфраструктура наноіндустрії створюється у вигляді національної нанотехнологічної мережі (ННТМ). ННТМ є одним з найважливіших організаційних інструментів, що забезпечують координацію робіт зі створення і розвитку наукової, технічної і технологічної бази в галузі нанотехнологій і наноматеріалів, об'єднують зусилля органів виконавчої влади і організацій для формування наноіндустрії.

Основними учасниками ННТМ є:

➢ Комітети Верховної Ради України (комітет з питань науково-інноваційного розвитку; комітет з питань промислової та інвестиційної політики; комітет з питань охорони здоров'я; комітет з питань науки і освіти; комітет з питань інформатизації та інформаційних технологій; комітет з питань економічної політики; комітет з питань екологічної політики, природокористування та ліквідації наслідків Чорнобильської катастрофи);

➢ Адміністрація Президента України (Головне управління з питань економічної політики та впровадження економічних реформ);

➢ Кабінет Міністрів;

➢ Міністерство фінансів;

➢ Міністерство економічного розвитку і торгівлі;

➢ Міністерство екології та природних ресурсів;

➢ Міністерство освіти і науки, молоді та спорту;

➢ Міністерство охорони здоров'я;

➢ Міністерство аграрної політики та продовольства;

➢ Національні і державні академії наук;

➢ Державне агентство з інвестицій та управління національними проектами;

➢ Державне агентство з питань науки, інновацій та інформатизації;

➢ Державна санітарно-епідеміологічна служба;

➢ Державна служба інтелектуальної власності;

➢ Державна ветеринарна та фітосанітарна служба;

➢ Державна служба з надзвичайних ситуацій;

➢ Державна екологічна інспекція;

➢ Державна інспекція техногенної безпеки;

➢ Державна інспекція з питань захисту прав споживачів;

➢ головна наукова організація – Національне науково-технологічне агентство наноматеріалів;

➢ головний центр медицини нанотехнологій – Національний науково-дослідний центр медицини нанотехнологій;

➢ головний центр охорони навколишнього середовища – Національний науково-дослідний центр охорони навколишнього середовища і ризиків нанотехнологій;

➢ головні галузеві організації, провідні галузеві об'єднання спеціалізованих науково-технологічних комплексів, науково-технічні центри, концерни, асоціації, що здійснюють дослідження і розробки у сфері нанотехнологій, випуск нанопродукції;

➢ провідні науково-освітні центри і заклади освіти;

➢ науково-проектні і промислові центри, лабораторії, технопарки у сфері високих технологій;

➢ наукові організації і центри трансферу технологій, що виконують дослідження і здійснюють збір і обробку науково-технічної інформації в галузі наноіндустрії, комерціалізацію наноматеріалів і нанотехнологій;

➢ підприємства і установи різних форм власності, групи і компанії, які здійснюють розробку і випуск науково-інноваційної продукції;

➢ організації та фізичні особи, що здійснюють фінансування проектів науково-інноваційного розвитку.

Метою формування ННТМ є:

➢ забезпечення оптимального виконання завдань і шляхів реалізації Концепції,

➢ досягнення і підтримка паритету з економічно розвиненими країнами за рахунок міжгалузевої і міжрегіональної координації в національному масштабі, активізації інноваційних і інвестиційних процесів з використанням механізмів державно-приватного партнерства,

➢ формування інфраструктури науково-технічної і підприємницької діяльності у сфері нанотехнологій і наноматеріалів,

➢ створення сприятливих умов для швидкого застосування комерційних видів нанотехнологічної продукції.

Учасники ННТМ в рамках власної діяльності мають переваги щодо:

➢ доступності інформації в сфері наноіндустрії та інших інформаційних ресурсів;

➢ доступності послуг, які надаються учасниками ННТМ, що функціонують в режимі центрів колективного користування;

➢ мінімізації ризиків, пов'язаних з розробкою і виробництвом нанотехнологічної продукції та науково-інноваційними технологіями;

➢ цільового бюджетного фінансування;

➢ сприяння в кадровому, інформаційно-аналітичному, правовому і організаційному забезпеченні діяльності;

➢ доступності консалтингових, маркетингових і інших видів послуг.

Діяльність учасників ННТМ базується на:

➢ узгодженні цілей і пріоритетів розвитку ННТМ, координації та контролю реалізації етапів робіт по виконанню проектів, пов'язаних з формуванням і розвитком ННТМ, реалізацією Концепції;

➢ проведенні узгодженої макроекономічної політики у сфері наноіндустрії;

➢ колегіальності ухвалення рішень, пов'язаних з реалізацією мети і завдань Концепції;

➢ фінансуванні вирішень пріоритетних завдань Концепції з державного бюджету України, бюджетів суб'єктів, позабюджетних джерел.

Учасники ННТМ реалізують дослідницькі, освітні, інфраструктурні або виробничі проекти в галузі наноіндустрії.

Діяльність учасників ННТМ здійснюється шляхом координації з відповідними керівниками і погодженням робіт з відповідними координаторами, відповідальними виконавцями-реалізаторами Концепції.

ННТМ має багаторівневу структуру і складається з організаційно самостійних підструктур по основних напрямах створення і розвитку наноіндустрії України (відповідно до **основних (приоритетних) напрямів Концепції**). Якісний склад і структура рівнів головних учасників ННТМ є наступною (табл. 2).

Головною організацією (учасник вищого рівня) є Державне агентство з питань науки, інновацій та інформатизації [52]. Воно відповідає за результати реалізації Концепції і визначає загальну кількість учасників другого рівня, яка повинна бути не більше ніж кількість основних напрямів Концепції. Учасник вищого рівня може об'єднувати основні (приоритетні) напрями і визначати відповідних учасників ННТМ другого рівня за згодою сторін для успішної реалізації Концепції.

Таблиця 2

Склад і структура рівнів головних учасників ННТМ

Рівень ННТМ	Назва організації
Вищий	Державне агентство з питань науки, інновацій та інформатизації
I (перший)	Комітет Верховної Ради з питань науково-інноваційного розвитку
	Міністерство економічного розвитку і торгівлі
	Міністерство екології та природних ресурсів
	Міністерство аграрної політики та продовольства
	Міністерство промислової політики України
	Міністерство фінансів
	Національні і державні академії наук
	Міністерство освіти і науки, молоді та спорту
	Міністерство охорони здоров'я
	Державне агентство з інвестицій та управління національними проектами
II (другий)	Національне науково-технологічне агентство наноматеріалів
	Національний науково-дослідний центр медицини нанотехнологій
	Національний науково-дослідний центр охорони навколишнього середовища і ризиків нанотехнологій
	Головні галузеві наукові організації
	Провідні галузеві науково-технологічні об'єднання, галузеві науково-технічні центри (концерни, асоціації)
III (третій)	Науково-освітні центри і навчально-наукові установи
	Науково-проектні і промислові центри, лабораторії
	Наукові парки і технопарки в галузі високих технологій
	Наукові організації і центри трансферу технологій
	Підприємства, групи, компанії та установи різних форм власності

По кожному з основних або пріоритетних напрямів учасником вищого рівня спільно з відповідним учасником ННТМ першого рівня визначається відповідна головна організація (учасник ННТМ другого рівня), яка формує відповідну підмережу ННТМ з учасниками другого, третього і інших рівнів з урахуванням перелічених вище принципів діяльності ННТМ.

За погодженням з учасником вищого рівня учасник ННТМ другого рівня може бути головною організацією, що відповідає за декілька основних (приоритетних) напрямів, визначених Концепцією.

Учасники першого рівня за згодою сторін і погодженням учасника вищого рівня можуть визначати одного спільного учасника другого рівня як головну організацію, що відповідає за відповідний основний (пріоритетний) напрям.

Наприклад, для напрямів 1, 2, 3, 4 Концепції головною спільною організацією Національної академії наук України і Міністерства освіти і науки, молоді та спорту України доцільним є учасник другого рівня - наукова організація ННТАН. Аналогічно для напрямів 7-8 Концепції головною спільною організацією Міністерства охорони здоров'я України і Академії медичних наук України пропонується учасник другого рівня - Національний науково-дослідний центр медицини нанотехнологій.

Основні учасники Концепції. Основними учасниками Концепції, що формують структурні та функціональні інституції і задіяні у процесі створення та застосування наукових знань та нанотехнологій, є члени ННТМ вищого, першого, другого і третього рівнів.

Функціональні дії головних організацій. Функціональні дії учасників ННТМ першого, другого і інших рівнів визначаються статутами цих організацій згідно чинного законодавства та інших нормативно-правових актів України.

Державне агентство з питань науки, інновацій та інформатизації є учасником вищого рівня, який здійснює:

➢ стимулювання державно-приватного партнерства у сфері розвитку наноіндустрії;

➢ забезпечення конкурентоспроможності наукоємних секторів економіки країни, сприяння створенню конкурентноспроможних вітчизняних учасників світового ринку продукції наноіндустрії;

➢ створення елементів інноваційної інфраструктури наноіндустрії;

➢ надання координаторові Концепції статистичної, довідкової, аналітичної інформації про хід робіт зі створення елементів інноваційної інфраструктури наноіндустрії для підготовки щорічної доповіді Верховній Раді України про хід реалізації Концепції.

Орган виконавчої влади вищого рівня ННТМ виконує наступні функції:

➢ розглядає спільно з головними організаціями ННТМ першого і другого рівнів проекти і програми у сфері наноіндустрії з метою подальшого надання фінансової підтримки;

➢ здійснює організаційну і фінансову підтримку науково-дослідних і дослідно-конструкторських розробок у сфері нанотехнологій, а також фінансову підтримку координації діяльності учасників ННТМ;

➢ здійснює фінансування проектів і програм у сфері нанотехнологій, що передбачають впровадження нанотехнологій або виробництво продукції у сфері наноіндустрії;

➢ здійснює фінансування проектів і програм по підготовці фахівців у сфері наноіндустрії;

➢ координує діяльність учасників ННТМ по реалізації державної політики щодо створення і розвитку наноіндустрії та обміну результатами науково-дослідних і дослідно-конструкторських робіт у сфері комерціалізації технологій наноіндустрії між учасниками ННТМ;

➢ здійснює моніторинг реалізації проектів і програм у сфері нанотехнологій, що фінансуються за рахунок коштів передбачених Державним комітетом з питань науково-інноваційного розвитку для реалізації положень Концепції;

➢ бере участь у фінансуванні заходів щодо забезпечення міжвідомчої взаємодії і координації заходів, що проводяться в рамках державних цільових і відомчих програм в галузі створення і розвитку наноіндустрії;

➢ бере участь у фінансуванні заходів щодо забезпечення координації виконання програм міжнародної науково-технічної співпраці в галузі наноіндустрії;

➢ бере участь у визначенні потреб ринку в сфері підготовки і підвищення кваліфікації фахівців, необхідних для розвитку і комерціалізації розробок наноіндустрії;

➢ бере участь у проведенні комплексної експертизи розробок і проектів у сфері нанотехнологій протягом всього їх інноваційного циклу - від ініціації до впровадження результатів;

➢ виконує інші функції відповідно до законів України та інших нормативних правових актів України.

Органи виконавчої влади першого рівня ННТМ в рамках Концепції здійснюють:

➢ організацію виконання науково-дослідних і технологічних робіт у сфері наноіндустрії, необхідних для інноваційного розвитку відповідних видів економічної діяльності;

➢ стимулювання впровадження перспективних технологій на користь забезпечення конкурентоспроможності вітчизняної наноіндустрії на внутрішньому і зовнішньому ринках;

➢ формування інфраструктури для трансферу технологій і комерціалізації продукції наноіндустрії цивільного та іншого призначення;

➢ організацію виробництва і просування на ринок продукції наноіндустрії;

➢ надання відповідному координаторові статистичної, довідкової, аналітичної інформації про хід виконання науково-дослідних і технологічних робіт, виробництво продукції в галузі нанотехнологій і про потенційні загрози у сфері життєдіяльності людини, пов'язані зі світовим розвитком нанотехнологій і про заходи щодо створення науково-технічної і нормативно-методичної системи забезпечення безпеки застосування нанотехнології, наноматеріалів і продукції на їх основі - для підготовки щорічного звіту у Верховній Раді України про хід реалізації Концепції.

Національні і державні академії наук України як учасники першого рівня ННТМ в рамках Концепції здійснюють:

➢ проведення фундаментальних досліджень у сфері нанотехнологій і наноматеріалів;

➢ участь у формуванні національної нанотехнологічної мережі на базі організацій, підвідомчих таким академіям наук;

➢ участь в реалізації і координації виконання програм міжнародної науково-технічної співпраці в галузі розвитку наноіндустрії;

➢ участь у визначенні та уточненні пріоритетних напрямів створення і розвитку нанотехнологій і наноматеріалів;

➢ надання відповідному координаторові статистичної, довідкової, аналітичної інформації про хід проведення фундаментальних досліджень в галузі нанотехнологій і наноматеріалів.

Учасники ННТМ першого і другого рівнів, головні галузеві науково-технологічні об'єднання і організації в рамках Концепції здійснюють:

➢ координацію розробок конкурентноспроможних на світовому ринку комерційних нанотехнологій, зокрема з використанням механізмів приватно-державного партнерства;

➢ координацію проектів міжнародної науково-технічної співпраці у сфері компетенції державних органів виконавчої влади по основних напрямах Концепції;

➢ координацію проектів трансферу нанотехнологій;

➢ сприяння інтеграції наукової і освітньої діяльності з метою підготовки фахівців для розвитку відповідної галузі;

➢ галузевий моніторинг заходів Концепції, включаючи збір інформації про її результативність, виробництво і продаж продукції наноіндустрії;

➢ вивчення і прогнозування властивостей наноматеріалів, функціональних наносистем;

➢ розробку нових галузевих нанотехнологій, конкурентноспроможних на світовому ринку;

➢ визначення єдиної термінології;

➢ розробку методики проведення вимірювань і випробувань;

➢ визначення критеріїв якості, відповідності, безпеки нанотехнологічної продукції;

➢ моніторинг впливу нанотехнологій на якість життя, умови праці, соціальні стандарти України;

➢ розробку нормативно-правової і методичної бази проведення патентних досліджень за визначенням технічного рівня і тенденцій розвитку, патентоспроможності, патентної чистоти і конкурентоспроможності розробок у сфері нанотехнологій;

➢ централізоване патентно-інформаційне забезпечення розробок у сфері нанотехнологій;

➢ консультаційний супровід патентних досліджень, що проводяться в організаціях, що працюють в галузі нанотехнологій;

➢ моніторинг патентування і ліцензування розробок у сфері нанотехнологій;

➢ надання відповідному координаторові Концепції узагальненої аналітичної інформації про хід робіт по забезпеченню патентної охорони розробок у сфері нанотехнологій;

➢ інші функції відповідно до законів України та інших нормативних правових актів України.

Навчально-наукові центри, наукові парки третього рівня ННТМ в рамках Концепції виконують функції:

➢ формують в тісній координації з відповідними учасниками ННТМ першого і другого рівня учбово-дослідницьку і дослідно-технологічну бази, забезпечуючи підготовку і підвищення кваліфікації фахівців на основі широкої інтеграції освітнього процесу, наукових досліджень і розробок в галузі нанотехнологій;

➢ створюють науково-методичне і організаційно-методичне забезпечення (державні освітні стандарти, програми підготовки, учбові плани, учбову і навчально-методичну літературу тощо) безперервного освітнього циклу в галузі нанотехнологій;

➢ розробляють в тісній взаємодії з учасниками ННТМ нові освітні технології та інструментальні засоби (інформаційні освітні технології, електронні підручники, системи видаленого доступу для дистанційної освіти, спеціалізоване учбове обладнання і так далі);

➢ здійснюють спільно з учасниками ННТМ фундаментальні і прикладні дослідження і розробки в галузі нанотехнологій з залученням студентів і аспірантів.

Технопарки і наукові парки, підприємства і установи різних форм власності як учасники третього рівня ННТМ в рамках Концепції виконують функції:

➢ формують в тісній координації з учасниками ННТМ другого і третього рівнів технологічну базу нанотехнологій;

➢ використовують науково-інноваційні технології і впроваджують результати учасників другого рівня ННТМ у власне промислове виробництво;

➢ здійснюють вихід власної продукції на світовий ринок нанотехнологій;

➢ здійснюють надходження до державного бюджету;

➢ задовольняють споживчі потреби економічного та суспільного розвитку;

➢ покращують умови праці та якість життя громадян Україні.

Управління, контроль за виконанням та координація зусиль. Керівний виконавчий орган і головний розпорядник коштів є Державне агентство з питань науки, інновацій та інформатизації, який є координаційно-колегіальним органом, дорадчим органом, що діє постійно. Він забезпечує взаємодію органів виконавчої влади з представниками підприємницького співтовариства і науковою громадськістю по виробленню пропозицій по реалізації державної політики в галузі нанотехнологій і наноіндустрії, науково-інноваційного розвитку.

До основних завдань Державного агентства з питань науки, інновацій та інформатизації відносяться попередній розгляд, проведення експертних оцінок, підготовка законопроектів і пропозицій, що носять рекомендаційний характер, пов'язаних з розробкою і практичним використанням досягнень науки і техніки в галузі нанотехнологій, розвитком наноіндустрії, формуванням ринку нанопродукції і послуг, заснованих на її застосуванні.

Відповідальним керівником і координатором, що здійснює управління процесом реалізації положень Концепції є керівник органу виконавчої влади вищого рівня ННТМ (голова Державного агентства з питань науки, інновацій та інформатизації).

Орган виконавчої влади вищого рівня ННТМ здійснює управління, консолідує зусилля, а саме:

➢ розробляє і приймає в межах своїх повноважень спільно з іншими органами виконавчої влади – учасниками ННТМ нормативні акти, необхідні для її виконання;

➢ вносить до комітету Верховної Ради з питань науково-інноваційного розвитку проекти законів, нормативних правових актів, документи, по яких потрібне рішення Верховної Ради України для забезпечення нормативної, методичної і інформаційної єдності Концепції;

➢ забезпечуює участь в управлінні реалізацією Концепції представників органів виконавчої влади, учасників ННТМ;

➢ організовує планування, моніторинг досягнення і щорічне коректування заходів Концепції і ресурсів для їх реалізації;

➢ створює науково-координаційні ради з пріоритетних напрямів Концепції, науково-експертні ради з контролю виробництва нанопродукції;

➢ ініціює експертні перевірки результатів, отриманих в ході реалізації Концепції, експертний контроль виробництва нанопродукції;

➢ надає учасникам Концепції статистичну, довідкову, аналітичну інформацію про хід її реалізації, звітність по реалізації Концепції;

➢ дає оцінку пропозицій розпорядників коштів – учасників Концепції з питань зміни об'ємів фінансування її заходів;

➢ готує щорічний звіт у Верховній Раді України про стан справ в галузі нанотехнологій і наноіндустрії, найважливіших наукових досягненнях і результатах, отриманих українськими ученими та у співпраці з ученими інших країн.

Співкоординаторами є представники учасників ННТМ першого рівня:

➢ з економічних питань, метрології та стандартизаці – міністр економічного розвитку і торгівлі;

➢ з фінансових питань – міністр фінансів;

➢ з наукових питань – президент НАНУ;

➢ з науково-освітніх питань і питань інтелектуальної власності – міністр освіти і науки, молоді та спорту;

➢ з питань охорони навколишнього середовища – міністр екології та природних ресурсів;

➢ з питань медицини і охорони здоров'я – міністр охорони здоров'я;

➢ з питань виробництва продукції – міністр промислової політики.

Співкоординатори Концепції є відповідальними виконавчими реалізаторами Концепції, які спільно і у межах власних повноважень здійснюють:

➢ координацію планів фундаментальних наукових досліджень і науково-технічних розробок, що виключає дублювання тематики пріоритетних напрямів Концепції, наукових досліджень і розробок, що виконуються для формування технологічної бази наноіндустрії в рамках державних цільових програм;

➢ координацію планів підготовки фахівців вищої кваліфікації і розробки освітніх програм в галузі наноіндустрії;

➢ наукову і технологічну експертизу заходів в галузі відповідних досліджень і розробок на всіх етапах реалізації Концепції, включаючи експертизу досягнутих результатів і визначення можливості їх промислового освоєння;

➢ проведення фундаментальних пошукових, науково-дослідних, дослідно-конструкторських і дослідно-технологічних робіт в галузі нанотехнологій і наноматеріалів, застосування результатів яких можливо в багатьох галузях економіки або приведе до появи нових її секторів;

➢ наукове і методичне забезпечення координації проектів міжнародної науково-технічної співпраці в галузі наукових досліджень і розробок у сфері нанотехнологій;

➢ оцінку перспектив, вироблення рекомендацій щодо використання і трансферу результатів досліджень і розробок різного призначення;

➢ забезпечення взаємодії з учасниками ННТМ з питань наукових досліджень, комерціалізації технологій, організації серійного виробництва, контролю виробництва нанопродукції;

➢ підготовку пропозицій по переліку унікального наукового устаткування, що забезпечує розробку принципово нових нанотехнологій, зокрема для потреб центрів колективного користування, участь у формуванні планів пріоритетних науково-дослідних робіт на вказаному устаткуванні, підготовку пропозицій по розвитку приладо-інструментальної бази, зокрема в частині унікального устаткування;

➢ забезпечення робіт із створення комплексного інформаційно-аналітичного забезпечення, моніторингу і прогнозування розвитку наноіндустрії;

➢ наукове і методичне забезпечення підготовки фахівців у сфері нанотехнологій і наноіндустрії, підготовки і підвищення кваліфікації фахівців в галузі нанотехнологій і наноматеріалів, а також менеджерів у сфері високих технологій;

➢ розробку пропозицій по уточненню заходів щодо реалізації Концепції, а також вдосконаленню механізму її реалізації;

➢ організацію ведення звітності по реалізації Концепції, забезпечення розміщення в мережі Інтернет матеріалів про хід і результати її реалізації, фінансування заходів, позабюджетні ресурси;

➢ сприяння розвитку інфраструктури для трансферу технологій і комерціалізації продукції наноіндустрії;

➢ організацію і ведення моніторингу ходу реалізації Концепції і оцінки її результативності;

➢ організацію експертних перевірок ходу реалізації окремих заходів Концепції;

➢ виявлення організаційних проблем в ході реалізації Концепції і підготовку пропозицій по їх розв'язанню;

➢ розміщення в мережі Інтернет текстів нормативних актів, що відносяться до формування і реалізації Концепції, а також методичних матеріалів в частині управління реалізацією Концепції і контролю за ходом виконання програмних заходів, матеріалів про хід і результати реалізації Концепції;

➢ інформаційно-аналітичне забезпечення підготовки щорічної доповіді Верховній Раді Україні про хід реалізації Концепції;

➢ надання статистичної, довідкової, аналітичної інформації про хід реалізації Концепції.

Основний контроль за виконанням і результатами реалізації Концепції, фінансовий контроль про обсяги витрачених фінансових ресурсів і хід виконання завдань Концепції передбачається проводити в установленому порядку з боку головного розпорядника коштів - органу виконавчої влади вищого рівня ННТМ, відповідального керівника, співкоординаторів, Кабінету Міністрів, державних Міністерств і відомств і з боку інших організацій – учасників Концепції.

Результати контролю надаються розпорядником коштів відповідальним координаторам свого рівня з наступним наданням цих даних до відповідного відповідального учасника ННТМ – координатора наступного вищого рівня з метою надання даних до головного розпорядника коштів.

Дамо перелік потенційного охоплення очікуваних результатів і інструменти реалізації Концепції.

Очікувані результати. Реалізація Концепції створить умови для виробництва нових видів продукції вітчизняної наноіндустрії та приведе до появи конкурентноспроможного сектора економіки досліджень і розробок в галузі наноіндустрії і формуванню інфраструктури наноіндустрії України.

Виконання і реалізація базових завдань Концепції передбачає такі очікувані результати:

➢ створення нанотехнологічної мережі України;

➢ створення й дослідження нового покоління наноматеріалів і нанотехнологій;

➢ використання вітчизняних нанотехнологій у провідних галузях науки і техніки, промисловому виробництві;

➢ вихід на світовий ринок нанотехнологій і збільшення частки високотехнологічної продукції в експорті України.

Створення і розвиток наноіндустрії Україні як стратегічно важливого елементу національної безпеки скоротить відставання від розвинутих країн, збільшить надходження до державного бюджету, об'єм валового внутрішнього продукту, задовольнить споживчі потреби економічного та суспільного розвитку, забезпечить розвиток інфраструктури ННТМ, покращить якість медичного обслуговування, умови праці та життя громадян Україні.

Для реалізації Концепції необхідна консолідація зусиль на внутрішньому і зовнішньому ринках з формування ННТМ для створення й дослідження нового покоління наноматеріалів і нанотехнологій з метою використання їх у провідних галузях науки і техніки, промисловому виробництві та для забезпечення необхідного рівня незалежності і безпеки держави.

Корелюючі нормативні документи. Досягнення зазначених цілей і виконання завдань Концепції можливі на основі правової бази функціонування сфери нанотехнологій, яка корелює з європейськими принципами з метою інтеграції Україні в нормативно-правовий простір конкурентного світового ринку нанотехнологій відповідно до вимог СОТ.

Концепція орієнтує національних виробників на впровадження нових технологій та створення нанотехнологічного обладнання на базі гармонізованих національних стандартів, а в разі їх відсутності – на застосування сучасних міжнародних та європейських стандартів і рекомендацій.

Положення Концепції повинні здійснюватися відповідно до Законів України із змінами і доповненнями [53–60]:

➢ "Про наукову і науково-технічну діяльність",

➢ "Про державне прогнозування та розроблення програм економічного і соціального розвитку України",

➢ "Про інноваційну діяльність",

➢ "Про наукову і науково-технічну експертизу",

➢ "Про наукову і науково-технічну діяльність",

➢ "Про пріоритетні напрями розвитку науки і техніки",

➢ "Про стандартизацію",

➢ "Про метрологію і метрологічну діяльність",

➢ "Про загальнодержавну комплексну програму розвитку високих наукоємних технологій",

➢ інших Законів України.

Положення Концепції мають відповідати документам Європейського інституту стандартів та з урахуванням рекомендацій, визначених у резолюціях Ради ЄС, Міжнародної організації стандартизації, та відповідати нормативним документам:

➢ Концепція розвитку національної інноваційної системи,

➢ Концепція науково-технологічного та інноваційного розвитку України,

➢ Угода про партнерство та співробітництво між Європейськими співтовариствами і Україною та їх державами-членами,

➢ Указ Президента Україні від 11.06.1998 № 615/1998 "Стратегії інтеграції Україні до Європейського Союзу",

➢ постанова Кабінету Міністрів України від 21.07.2006 року № 1001 "Про затвердження Державної стратегії регіонального розвитку на період до 2015 року" [61–62].

Інструменти реалізації Концепції. Основними інструментами реалізації Концепції є цільові програми, і пов'язані з ними процедури відбору проектів, експертиза заявок, визначення механізмів фінансування, цільове замовлення досліджень і науково-інноваційних розробок в галузі нанотехнологій.

Реєстрація науково-інноваційних проектів в галузі нанотехнологій згідно із Законом України "Про інноваційну діяльність" дає можливість одержання фінансової підтримки за рахунок Державного бюджету України, бюджету Автономної Республіки Крим і місцевих бюджетів.

Іншими інструментами створення і розвитку нанотехнологій в Україні є міжнародні програми і проекти, в ході реалізації яких здійснюватиметься:

➢ сприяння залученню іноземних інвестицій в розвиток і розповсюдження нанотехнологій і наноіндустрії;

➢ сприяння розвитку торгівлі нанотехнологічними матеріалами і устаткуванням, ноу-хау, послугами;

➢ співпраця з метою гармонізації вітчизняної та зарубіжної нормативно-правової бази регулювання нанотехнологій.

Фінансове забезпечення. Видатки, пов'язані з виконанням положень Концепції передбачається здійснювати за рахунок коштів державного і місцевих бюджетів, а також інвестицій підприємств та організацій різних форм власності, грантів міжнародних організацій і фізичних осіб. Обсяг фінансових ресурсів буде визначатись при підготовці плану заходів для реалізації Концепції на підставі аналізу стану та прогнозування тенденцій розвитку економіки країни.

Об'єми і джерела фінансування за необхідністю коректуються за підсумками аналізу ефективності її реалізації і рівня досягнення запланованих результатів після затвердження кожним учасником ННТМ першого і другого рівня річного плану роботи, в межах наявних бюджетних і інших коштів.

7. Висновки

Третій закон технології:
"Будь-яка розвинена технологія не відрізняється від магії"
Артур Кларк
(Arthur Charles Clarke, 1917–2008)
англійський письменник, вчений, футуролог, винахідник

По-перше, пропонується широке використання принципу "me-too product" в Україні на початкових етапах науково-інноваційного впровадження нових розробок для того, щоб швидко стати країною з розвиненими технологіями і запропонувати широкий спектр продуктів "me-too product" на світових ринках.

По-друге, наголошено на національних пріоритетах і першочергової потреби створення на території України сучасного науково-технологічного агентства наноматеріалів, яке матиме статус національного центру колективного користування.

По-третє, аргументовано необхідність врахування впливу інноваційної діяльності в галузі нанотехнологій на появу нових видів ризиків, що зумовлено токсичністю, стійкістю і біологічним накопиченням. Запропоновано створення центрів колективного користування: національного науково-дослідного центру медицини нанотехнологій, національного науково-дослідного центру охорони навколишнього середовища і ризиків нанотехнологій.

По-четверте, запропоновано комплекс заходів для створення і розвитку вітчизняної наноіндустрії, що передбачає попередню підготовчу роботу в 2015–2020 роках і реалізацію законопроекта у вигляді Концепції на 2020–2030 роки. Сформульовано мету, названо учасників Концепції та розкрито функціональні дії головних організацій національної нанотехнологічної мережі. Зазначається, що досягнення цілей і виконання завдань Концепції можливі на основі правової бази функціонування сфери нанотехнологій, яка має корелювати з європейськими принципами з метою інтеграції Україні в нормативно-правовий простір конкурентного світового ринку нанотехнологій відповідно до вимог СОТ.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Nanotechnology.* – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://en.wikipedia.org/wiki/Nanotechnology. – Назва з екрану.
2. *Шірінян А. С.* Актуальні проблеми наноматеріялів і нанотехнологій / А. С. Шірінян, В. А. Макара // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. – 2010. – Т. 8, № 2. – С. 223–269.
3. *Поручник А.* Інноваційний потенціал України та його реалізація в міжнародному науково-технічному співробітництві / А. Поручник // Міжнародна економічна політика. – 2004. – № 1. – С. 11–15.
4. *Скороход В. В.* Фізико-хімічна кінетика в наноструктурних системах / В. В. Скороход, І. В. Уварова, А. В. Рагуля. – Київ: Академперіодика, 2001. – 180 с.
5. *Gleiter H.* Nanostructured materials: State of the art and perspectives / H. Gleiter // Nanostructural Materials. – 1995. – V. 6. – P. 3–14.
6. *Петров Ю. И.* Физика малых частиц / Ю. И. Петров. – Москва: Наука, 1982. – 360 с.
7. *Андриевский Р. А.* Размерные эффекты в нанокристаллических материалах. II. Механические и физические свойства / Р. А. Андриевский, А. М. Глезер // Физика металлов и металловедение. – 2000. – V.89, №1. – С. 91–112.
8. *Квантові* низькорозмірні системи / А. П. Шпак, Ю. А. Куницький, О. О. Коротченков та ін. – Київ: Академперіодика, 2003. – 310 с.
9. *Непийко С. А.* Физические свойства малых металлических частиц / С. А. Непийко. – Киев: Наукова думка, 1985. – 248 с.
10. *Ратнер Д.* Нанотехнология: простое объяснение очередной гениальной идеи: Перевод с английского и редакция А. В. Назаренко / Д. Ратнер. – Москва: Издательский дом "Вильямс", 2004. – 240 с.
11. *Drexler K. E.* Engines of Creation The Coming Era of Nanotechnology / K. E. Drexler. – New York: Anchor Press, 1986 – 298 p.
12. *Richard Smalley.* – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://en.wikipedia.org /wiki / Richard_Smalley. – Назва з екрану.
13. *Копань В. С.* Охорона праці в гуманітарній сфері: навчальний посібник / В. С. Копань. – К.: Університетське видавництво "ПУЛЬСАРИ", 2008. – 200 с.
14. *Lauterwasser C.* Small sizes that matter: Opportunities and risks of Nanotechnologies. Report in co-operation with the OECD International Futures Programme. / C. Lauterwasser. – Munchen: Allianz Center for Technology. – 2006. – 45 p.
15. *Комитет* по науке и технологиям Правительства США. – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://nano.gov. – Назва з екрану.
16. *Бобровский С.* Сколько же места там, внизу? Нанотехнологии: от отрицания до признания – за четыре года // – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://www.gumer.info /bibliotek_Buks/Science/Article/bobr_skolko.php. – Назва з екрану.
17. *Roco M.C.* International perspective on government nanotechnology funding in 2005 / M. C. Roco // Journal of Nanoparticle Research. – 2005. – Vol. 7. – P. 707–712.
18. *Контактна* взаємодія наночастинок золота з пухлинними клітинами: вплив розміру та концентрації / Л. С. Рєзніченко, С. І. Шпильова, Т. Г. Грузіна, та ін. // Доповіді НАН України. – 2010. – № 2. – С. 171–175.
19. *Kevin D. L.* Health and Environmental Impact of Nanotechnology: Toxicological Assessment of Manufactured Nanoparticles / D. L. Kevin // Toxicological Sciences. – 2004. – Vol. 77. – P. 3–5.
20. *Pulmonary* Toxicity of Single-Wall Carbon Nanotubes in Mice 7 and 90 Days After Intratracheal Instillation / C.-W. Lam, J. T. James, R. McCluskey та ін. // Toxicological Sciences. – 2004. – Vol. 77. – P. 126–134.
21. *Ширинян Л. В.* Нанотехнологии – новое направление развития инновационной деятельности в Украине, потенциальный класс риска и объект страховой защиты / Л. В. Ширинян // Проблеми науки. – 2010. – № 6. – С. 34–40.
22. *Шірінян А. С.* Національне науково-технологічне агентство наноматеріалів – запорука успішного розвитку майбутньої техносфери України / А. С. Шірінян // Наука та Інновації. – 2009. – Том 5, № 2. – С. 32–37.
23. Закон України "Про наукові парки" // Відомості Верховної Ради України (ВВР). – 2009. – № 51. – С. 757.
24. *Рудакова И. Е.* Инновационный процесс в странах развитого капитализма / И. Е. Рудакова. – Москва: МГУ, 1991. – 144 с.
25. *Семиноженко В.* Технологічні парки України: перший досвід формування інноваційної економіки / В. Семиноженко // Економіка України. – 2004. – № 1. – С. 16–21.
26. *Створення* та функціонування технопарків / Український фонд підтримки підприємництва, 2009. – 35с. – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://ufpp.gov.ua/ckfinder/userfiles/files/lib_bissnes/TehnoparkS.pdf. – Назва з екрану.
27. *Закон* України "Про науковий парк "Київська політехніка" // Відомості Верховної Ради України (ВВР). – 2007. – № 10. – С. 86–87.
28. *Про* науковий парк "Київська політехніка". – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://spark.kpi.ua/uk/about. – Назва з екрану.
29. *Корпорація* "Науковій парк КНУ імені Тараса Шевченка" запрошує до співпраці. – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://www.univ.kiev.ua / ua/news/3451/. – Назва з екрану.
30. *Розпочав* діяльність Науковий парк "Наукоград-Харків". – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://kharkivoda.gov.ua/en/news/view/id/11966. – Назва з екрану.
31. *Шулаев В. М.* О природе неорганических наноматериалов / В. М. Шулаев // Металлообработка. – №6. – 2007. – С. 2–5.
32. *Research* and innovation: HORIZON 2020. – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://ec.europa.eu/research/horizon2020/. – Назва з екрану.
33. *Соглашение* о создании общего научно-технологического пространства государств-учасников Содружества Независимых Государств // Инновации. – 2002. – № 1. – С. 6–7.
34. *Федеральное* агентство по делам Содружества Независимых Государств, соотечественников, проживающих за рубежом, и по международному гуманитарному сотрудничеству (Россотрудничество). – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://rs.gov.ru/node/28132. – Назва з екрану.
35. *Прогноз* науково-технологічного та інноваційного розвитку України (попередній варіант) / Під редакцією акад. НАН України А.П. Шпака та акад. АПН України А.М. Гурія. Упорядники Маліцький Б.А. та Попович О.С. – Зб-к матеріалів. – К.: Фенікс, 2006. – 160 с.
36. *Розпорядження* Кабінету Міністрів № 873 від 2 квітня 2009 року "Про схвалення Концепції державної цільової науково-технічної програми "Нанотехнології та наноматеріали" на 2010–2014 роки" // Офіційний вісник України. – 2009. – № 26. – С. 57.
37. *Постанова* Кабінету Міністрів України № 1231 від 28 жовтня 2009 р. "Про затвердження Державної цільової науково-технічної програми "Нанотехнології та наноматеріали" на 2010–2014 роки". – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://zakon3.rada.gov.ua/laws/show/ 1231-2009-%D0%BF. – Назва з екрану.
38. *Mei Q. S.* Melting and superheating of crystalline solids: from bulk to nanocrystals / Q. S. Mei, K. Lu // Progress in Materials Science. – 2007. – Vol. 52. – P. 1175–1262.
39. *Baletto F.* Structural properties of nanoclusters: Energetic, thermodynamic, and kinetic effects / F. Baletto, R. Ferrando // Reviews of Modern Physics. – 2005. – Vol. 77. – P. 371–390.
40. *Етика* нанотехнологій та нанобезпека. Матеріали міжнародного семінару / Упорядник М. О. Чащин. – К.: НАНУ, 2011. – 69 с. – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://biomed.nas.gov.ua/files/seminar_nano.pdf. – Назва з екрану.
41. *Демецька О. В.* До проблеми регламентації наноматеріалів / О. В. Демецька, О. Б. Леоненко, Т. Ю. Ткаченко, Н.С. Леоненко // Сучасні Проблеми Токсикології. – 2012. – №1. – С. 52–56.
42. *Balas F.* Reported nanosafety practices in research laboratories worldwide / F. Balas // Nature Nanotechnology. – 2010. – № 5. – P. 93–96.
43. *Чекман І. С.* Нанозолото та нанопокриття із золота: стан наукових досліджень, перспективи застосування у медицині / І. С. Чекман, А. О. Прискока // Український Медичний Часопис. – 2010. – № 2 (76). – С. 37–43.

44. *Патон Б.Є.* Нанонаука і нанотехнології: технічний, медичний та соціальний аспекти / Б. Є. Патон, В. Ф. Москаленко, І. С. Чекман, Б. О. Мовчан // Вісник НАН України. – 2009. – № 6. – С. 18–26.
45. *Чекман І. С.* Основи наномедицини / І. С. Чекман, В. О. Маланчук, А. В. Рибачук. – Логос, 2011. – 250 с.
46. *3-я* Школа "Метрология и стандартизация в нанотехнологиях и наноиндустрии" 26–29 Мая 2010 года / Черноголовка: Государственная корпорация "Российская корпорация нанотехнологий", 2010. – 40 с. – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://www.rusnano-mc.com/ru. – Назва з екрану.
47. *Горынин И.В.* Исследования и разработки ФГУП ЦНИИ КМ "Прометей" в области конструкционных наноматериалов. / И. В. Горынин // Российские нанотехнологии. – 2007. – Том 2, № 3–4. – С. 37–57.
48. *Владленова І. В.* Нанотероризм: нові можливості та соціальні загрози / І. В. Владленова, Е. А. Кальницький // Вісник Національної юридичної академії України імені Ярослава Мудрого. – 2011. – № 9. – С. 64–73.
49. *Бузгалин А.* "Постиндустриальное общество" – как тупиковая ветвь социального развития? / А. Бузгалин // Вопросы философии. – 2002. – № 5. – С. 26–43.
50. *Чоловська Н.* Суспільство ризику в контексті викликів техногенної цивілізації / Н. Чоловська // Вісник Львівського ун-ту ім. Івана Франка. – 2010. – Вип. 13. – С. 68–75.
51. *Сухоруков А.І.* Проблеми інноваційної безпеки / А. І. Сухоруков // Стратегічна панорама. – 2002. – №2. – С. 131–139.
52. *Державне* агентство з питань науки, інновацій та інформатизації України. – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://dknii.gov.ua/. – Назва з екрану.
53. *Закон* України "Про наукову і науково-технічну діяльність". – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://zakon2.rada.gov.ua/laws /show/ 1977-12. – Назва з екрану.
54. *Закон* України "Про державне прогнозування та розроблення програм економічного і соціального розвитку України". – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://zakon4.rada.gov.ua/laws/show/ 1602-14. – Назва з екрану.
55. *Закон* України "Про інноваційну діяльність" // Голос України. – 2002. – № 144. – С. 10–15.
56. *Закон* України "Про наукову і науково-технічну діяльність". – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://zakon2.rada.gov.ua/laws/show /1977-12. – Назва з екрану.
57. *Закон* України "Про пріоритетні напрями розвитку науки і техніки". – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://zakon4.rada. gov.ua/ laws/show/2623-14. – Назва з екрану.
58. *Закон* України "Про стандартизацію". – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://zakon2. rada.gov.ua/laws/show/2408-14. – Назва з екрану.
59. *Закон* України "Про метрологію і метрологічну діяльність". – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://zakon4.rada.gov.ua/laws/show /113/98-вр. – Назва з екрану.
60. *Закон* України "Про загальнодержавну комплексну програму розвитку високих наукоємних технологій". – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://zakon1.rada.gov.ua/laws/show/1676-15. – Назва з екрану.
61. *DIRECTIVE* 2002/95/EC of the European Parliament and of the Council // Official Journal of European Union. – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://www.raditek.com/Press%20Releases. – Назва з екрану.
62. *Постанова* Кабінету Міністрів України від 21.07.2006 року № 1001 "Про затвердження Державної стратегії регіонального розвитку на період до 2015 року". – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://zakon2.rada.gov.ua/laws/show/1001-2006-п. – Назва з екрану.

Надійшла до редколегії 07.03.14

А. Ширинян, д-р. физ.-мат. наук., доц.,
В. Макара, д-р физ.-мат. наук., проф.
КНУ шимени Тараса Шевченко, Киев

КОНЦЕПЦИЯ СОЗДАНИЯ И РАЗВИТИЯ НАНОИНДУСТРИИ В УКРАИНЕ

Обсуждаются проблемные вопросы нанотехнологий и общества и разработана Концепция создания и развития наноиндустрии в Украине. Предагается многоуровневая структура национальной нанотехнологической сети, где управление и координация действий осуществляется участником высшего уровня, ответственным и главным распорядителем свойств – Государственным агентством по вопросам науки, инноваций и информатизации.

Ключевы слова: проблемные вопросы нанотехнологий, инновации и информатизация.

A. Shirinian, Dr. Sci. (Phys.-math), doc.
V. Makara, Dr. Sci. (Phys.-math),
National Taras Shevchenko University of Kiev

CONCEPTION OF CREATION AND DEVELOPMENT OF NANO-INDUSTRY IN UKRAINE

The nano-technology related problems of the society are discussed and it is elaborated the Conception of creation and development of nano-industry in Ukraine. It is offered the multilevel structure of the national nano-technology network structure, where a management and coordination will be carried out by the participant of highest level, responsible and leading manager of facilities – by the State agency on science, innovations and informatization.

Keywords: nano-technology related problems, innovations and informatization.

Наукове видання

ВІСНИК

КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ФІЗИКА

Випуск 1/2(16/17)

Оригінал-макет виготовлено ВПЦ "Київський університет"

Автори опублікованих матеріалів несуть повну відповідальність за підбір, точність наведених фактів, цитат, економіко-статистичних даних, власних імен та інших відомостей. Редколегія залишає за собою право скорочувати та редагувати подані матеріали. Рукописи та дискети не повертаються.

Формат 60x84 1/8. Ум. друк. арк. 7,4 . Наклад 300. Зам. № 214-7249.
Гарнітура Arial. Папір офсетний. Друк офсетний. Вид. Фз1.
Підписано до друку 12.03.15

Видавець і виготовлювач
ВПЦ "Київський університет"
01601, Київ, б-р Т. Шевченка, 14, кімн. 43
☎ (38044) 239 32 22; (38044) 239 31 72; тел./факс (38044) 239 31 28
e-mail: vpc@univ.kiev.ua
http: vpc.univ.kiev.ua
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 1103 від 31.10.02