Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0212U004039

Державний реєстраційний номер: 0109U000220

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-01-2012

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Дослідження енергетичних характеристик 2D і 0D металевих систем: вільних плівок і кластерів; плівок, вкритих шаром діелектрика

Початок етапу: 01.2011

Закінчення етапу: 12.2011

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Запорізький національний технічний університет

Код за ЄДРПОУ: 02070849

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (061) 769-82-35, (061) 224-42-36

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 54.82

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Оптичні, поверхневі і тунельні ефекти в металевих наноструктурах

Назва роботи англійською:

Optical, surface and tunnelling effects in the metal nanostructures

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - низькорозмірні металеві системи і поверхня напівнескінченного металу, вкритого шаром діелектрику. Мета роботи - дослідження енергетичних, кінетичних і оптичних характеристик обмежених металевих систем. Розраховано частотні і розмірні залежності коефіцієнту поглинання композитів з наночастинками Al та Cu. Розв'язано рівняння Максвела для металевої плівки нанометрової товщини в оптичному діапазоні частот. Розраховано коефіцієнти відбивання і поглинання неоднорідних за товщиною нанометрових плівок. У рамках двотемпературної моделі досліджено нагрів електронної підсистеми металевого кластера. З використанням розмірної залежності температури Дебая оцінено залежність ефективної електронної температури від зовнішньої напруги. Запропоновано просту схему електронного нагріву, яка дозволяє розрахувати розмірну залежність температури електронної підсистеми гранул. Розроблено метод обчислення уширення енергетичних рівнів у гранулах-дисках триелектродної тунельної структури в рамках формалізму S-матриці розсіяння. Розраховано залежність уширення рівнів від геометричних параметрів структури. Модифіковано теорію одноелектронного транспорту. Модель електронного транзистора враховує уширення енергетичних рівнів гранул і нагрів електронів. У рамках самоузгодженого методу Кона-Шема і моделі стабільного желе розроблено алгоритми для розрахунку і розраховано профілі електронної густини і ефективного потенціалу, роботу виходу електронів і поверхневу енергію металевих пластин і сферичних кластерів. Розраховано розмірні залежності енергетичного спектру і енергії Фермі 2D плівок і 0D кульок. Показано, що наявність діелектричного покриття з одного із боків пластини спричинює витягування хвоста потенціалу у цей бік, при цьому глибина ефективного потенціалу зменшується із збільшенням середнього значення діелектричних проникностей зліва і справа від металу. Встановлено, що розмірні залежності роботи виходу електронів і поверхневої енергії мають осциляційний характер; наявність діелектричного покриття на поверхнях зменшує значення роботи виходу електронів.

Реферат англійською:

A object of the research is low-dimensional metal systems and the surface of a semi-infinite metal covered with a dielectric layer. A purpose is to study the energy, kinetic and optical properties of confined metal systems. Frequency and size dependences of the absorption coefficient for composites with Al and Cu nanoparticles are computed. Maxwell equations are solved for a metal film of nanometer thickness in the optical frequency range. Calculations of reflection and absorption coefficients are performed for nanometer films inhomogeneous in thickness. Heating of an electronic subsystem metal cluster is investigated within the limits of two-temperature model. The dependence of effective electronic temperature from an external bias voltage is estimated with use dimensional dependence of Debye temperature. The simple scheme of electronic heating which allows to calculate successfully dimensional dependence of temperature of an electronic subsystem of a granule is offered. A method of calculation the broadening levels in granules-disks of three-electrode tunnel structure within the limits of formalism scattering S-matrix is developed. The dependence of the broadening levels from geometrical parameters of a structure is calculated. The theory of single-electronic tunnelling is modified. Model the single-electronic transistor considers the broadening levels and electron heating of granules. Spatial electron distribution and effective potential, electron work function and surface energy of metal slabs and spherical clusters are investigated within the limits of the self-consistent Kohn-Sham theory and models of stable jellium. Size dependences of energy spectrum and the Fermy energy are expected for 2D films and 0D sphere. It is shown that

the effect of a dielectric covering on one of parties of plate results to "drawing out" a tail of effective potential for metal surface in this side and to reduction of effective potential with increase of mean value of a dielectric covering constant on the left and on the right of metal. It is set that size dependences of electron work function and surface energy oscillate; the dielectric covering on the metal surfaces diminishes the electron work function.

Індекс УДК: 539.2;538.9-405;548, 539.21

Коди тематичних рубрик: 29.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Погосов Валентин Вальтерович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Модель поглинання ІЧ-випромінювання металевими структурами зниженої розмірності за умов варіації характеристичного розміру. Модель одноелектронного транспорту в металевих наносистемах. Методика розрахунку квазістаціонарних станів у рамках формалізму S-матриці.

Назва НТП англійською: The absorption model of infrared radiation with low-dimensional metal structure (provided) under condition of variation of characteristic size. The single-electron transport model in metal nanosystems. Calculation procedure of quasistationary states in the S-matrix formalism.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: 5 Нові комп'ютерні засоби та технології інформатизації суспільства

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Створено модель відбивання, поглинання і проходження ІЧ випромінювання в субатомних металевих структурах за умов варіації їх товщини. Розраховано коефіцієнт поглинання композитів з різним вмістом металевих наночастинок і оптичні характеристики металевих наноплівок з варіаціями товщини. Модифіковано фізичну і математичну модель одноелектронного транспорту в металевих наносистемах врахуванням ефектів нагріву електронної підсистеми і уширення енергетичних рівнів. Розроблено методику розрахунку кінетичної (ефективної) температури перегрітої електронної підсистеми кластера при протіканні через нього струму в рамках двотемпературної моделі. У системі прямокутних потенціальних бар'єрів розроблено метод розрахунку квазістаціонарних станів та уширення рівнів у рамках формалізму S - матриці розсіяння. В рамках самоузгодженого методу Кона-Шема розроблено алгоритми і обчислено енергетичні характеристики металевих 2D пластин і 0D кульок, поверхня яких вкрита діелектриком.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:** 31.12.2011
- **Закінчення етапу:**

Споживачі продукції: Підприємства мікро- та наноелектроніки

Перспективні ринки: -

Характер співробітництва з інвестором

- **Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:**
- **Права, що надаються інвестору після завершення роботи:**
- **Наявність бізнес-плану:**
- **Техніко-економічне обгрунтування:**
- **Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**
- **Очікуваний термін окупності (років):**
- **Додаткова інформація:**

IX. Бібліографічний опис

1. Pogosov, V.V. Future of magic nanoclusters of molecular transistors [Текст] / V.V.Pogosov, E.V.Vasyutin, A.V.Babich // Радіоелектроніка, інформатика, управління.- 2009.- №2.- С. 20-32. 2. Babich, A.V. Effect of dielectric coating on the electron work function and surface stress of a metal [Текст] /V.V.Pogosov, A.V. Babich // Surface Science.- 2009.- V.603.- P. 2393-2397. 3.Курбацкий, В.П. Энергия Ферми и оптическая проводимость квантовых металлических нитей [Текст] /В.П. Курбацкий, А.В.Коротун, А.В.Бабич, В.В.Погосов //Физика твердого тела.- 2009.- Т.51.- №12.- С.2371-2378. 4. Коротун, А.В. Оптична провідність металевих нанодротиків [Текст] / А.В.Коротун, В.П.Курбацький, В.В.Погосов // Фізика і технологія тонких плівок і наносистем: XII Міжнар. конф., 18-23 травня 2009р., тези доповыды.- Івано-Франківськ.- 2009 .-С.310-311. 5. Pogosov, V.V. Effects of broadening of levels and electron overheating in molecular transistor based on metal cluster [Текст] /V.V.Pogosov, A.V.Babich // Clustered and Nanostructured Matherials (CNM-2) : міжнар. наукова конф., 27-30 вересня 2009 р.: тези доповіді.-Ужгород, 2009.-P.16. 6. Погосов, В.В. Работа выхода электронов деформированных металлов [Текст] /В.В.Погосов, П.В.Вакула //Вісник двигунобудування.- 2009.- № 1.- С.58-61. 7.Погосов, В.В. К вопросу о позитронной диагностике дефектных металлов: вакансии [Текст] /В.В.Погосов, П.В.Вакула // Вісник двигунобудування.- 2009.- №1.- С.148-150. 8 Бабич, А.В. Еффекты уширения уровней и перегрева электронов в туннельных структурах на металлических кластерах [Текст] /А.В.Бабич, В.В.Погосов // Физика твердого тела.- 2010.- Т. 52.- №1.- С.165-171. 9 Babich, A.V. Effects of electron levels broadening and electron temperature in tunnel structures based on metal nanoclusters [Текст] /A.V.Babich V.V.Pogosov // Surface Science.-2010.- V.604.- P. 210-216. 10 Погосов, В.В. Елементи фізики поверхні, наноструктур і технологій [Текст] / В.В.Погосов, Ю.А.Куницький, А.В. Бабіч, А.В.Коротун.- Запоріжжя: ЗНТУ, 2010.- 365 с. 11 Бабич, А.В. Влияние уширения дискретных уровней гранулы на характер вольт-амперной характеристики одноэлектронного диода [Текст] /А.В.Бабич, В.В.Погосов, А.М.Багинский, Н.Н.Нагорная, А.Г.Кравцова / Микроэлектроника .- 2010.- Т.39.- №3.- С.1-7. 12 Бабіч, А.В. Енергетичні характеристики деформованого контакту метал - діелектрик [Текст] // А.В.Бабіч, В.В.Погосов, Г.Г.Кравцова, В.П.Курбацький, Г.В.Сніжной //Фізика і хімія твердого тіла.-2010.- Т.11.- №3.- С. 567-574. 13 Kurbatsky, V.P. Optical conductivity of metal nanofilms and nanowires: The rectangular-box model [Текст] /V.P.Kurbatsky, V.V.Pogosov // Physical Review B.- 2010.- V.81.- P.155404. 14 Pogosov, V.V. On the work of the molecular transistor based on gold cluster [Текст] /V.V.Pogosov, A.V.Babich, A.G.Kravtsova // Сучасні проблеми і досягнен-ня в галузі радіотехніки, телекомунікацій та інформаційних технологій : міжн. конф., вересень 2010 р. : тези доповіді.- Запоріжжя, 2010.--С.136-137. 15 Pogosov, V.V. Effects of broadening of levels and electron overheating in molecular transistor based on metal cluster [Текст] /V.V.Pogosov, A.V.Babich, A.G.Kravtsova // Взаємодія атомних частинок і кластерів з поверхнею твердого тіла : міжнар. семінар, 27 вересня 2010 : тези доповіді.- Запоріжжя.- С.23. 16 Погосов, В.В. Нанофізика і нанотехнології [Текст]: навч. посібник з грифом МОНУ / В.В.Погосов, Ю.А.Куницький, А.В.Бабіч, А.В.Коротун, А.П.Шпак .- Запоріжжя: ЗНТУ, 2011. - 368 с. 17 Коротун, А.В. Збірник задач з фізики конденсованого стану [Текст]: навч. посібник з грифом МОНУ / В.В.Коротун, І.М.Тітов, Ю.А.Куницький, В.В.Погосов.- Запоріжжя: ЗНТУ, 2011.- Т.1 - 358 с., Т 2 - 470 с. 18 Бабіч, А.В. Поверхневі та тунельні ефекти в металевих наноструктурах [Текст] : автореф. дис. ... канд. фіз.-матем. наук : захищена 14.06.2011 : затв. / Бабіч Андрій Вікторович.- Запоріжжя: ЗНТУ, 2011.-20 с. 19 Курбацкий, В.П. К расчету оптического поглощения композитов с металлическими наночастицами [Текст] /В.П.Курбацкий, А.В.Коротун, Ю.А.Куницкий, В.В.Погосов //Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології.- 2011.- Т.9.- №1.- С. 23-32. 20 Погосов, В.В. О работе выхода позитрона из металла с диэлектрическим покрытием [Текст] /В.В.Погосов, А.В.Бабич, П.В.Вакула, А.Г.Кравцова //Журнал технической физики.- 2011.- Т.81.- №.11.- С. 150-151. 21 Вакула, П.В. К расчету характеристик позитрона в дефектных металлах [Текст] / П.В.Вакула, А.В.Бабич, В.В.Погосов, Ю.А.Куницкий //Металлофизика и новейшие технологии.- 2011.-Т.33.- №10.- С.1001 - 1014. 22 Вакула, П.В. Вариационные вычисления характеристик позитрона в металах [Текст] / П.В.Вакула, А.В.Бабич, Ю.А.Куницкий, В.В.Погосов //Физика металлов и металловедение.- 2011.- Т.112.- № 6.- С. 1-7.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Внуков Юрій Миколайович

Перелік осіб-виконавців

Бабіч А.В.

Булатецька Т.В.

Вакула П.В.

Коротун А.В.

Курбацький В.П.

Погосов В.В.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності