Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0214U001120

Державний реєстраційний номер: 0113U001097

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-01-2014

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розмірні ефекти в плівкових гетероструктурах і квантових точках. Позитронні вакансійні стани

Початок етапу: 01.2013

Закінчення етапу: 12.2013

Вид звітного документа: Проміжний 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.): 82.89

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розмірні електронні ефекти в металевих наноструктурах і нанодефектах металу

Назва роботи англійською:

Size electron effects in metallic nanostructures and nanodefects of metal

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - низьковимірні металеві системи, нанодефекти в металах і відкриті квантові точки. Мета роботи - розробка елементів теорії, експериментальних досліджень і побудова фізичних моделей розмірних ефектів в мезоструктурах. Розроблено конструкцію і алгоритм роботи автоматизованої установки для вимірювання поверхневого потенціалу. Установка дозволяє вимірювати поверхневий потенціал зразків металів та напівпровідників методом Кельвіна як за кімнатних умов так і у вакуумі. Розроблено алгоритм розрахунку S-матриці розсіювання для руху електрона в одновимірному потенціальному профілі довільної форми. Розраховано полюси S-матриці розсіювання, резонансні енергії і уширення квазістаціонарних рівнів циліндричної квантової точки у зовнішньому електричному полі. Модифіковано теорію одноелектронного тунелювання і ВАХ відкритої металевої квантової точки з урахуванням уширення рівнів. .Для обчислення коефіцієнту пропускання металевих плівок нанометрової товщини в інфрачервоній області запропоновано формулу, засновану на моделі газу вільних носіїв в наближенні Друде для діелектричної функції з параметрами, які залежать від товщини плівки і частоти. Результати обчислень порівнювались з експериментальними даними з пропускання плівок Pb товщиною 0-5 нм в інтервалі частот 1000-4000 1/см. Встановлено, що ефективна маса носіїв в плівці помітно менша за її значення в нескінченному металі, і виявлено частотну залежність швидкості релаксації і плазмової частоти. Досліджено вплив діелектричного оточення на розмірні осциляції енергії Фермі металевих нанометрових плівок. Отримано аналітичний вираз для діелектричної функції металевої нано плівки. Досліджено вплив геометрії поперечного перерізу на енергетичні характеристики 1D-металевих систем. Отримано розмірні залежності енергії Фермі кругового та еліптичного нанодротів. Виявлено, що зміну форми поперечного перерізу нанодроту у першому порядку теорії збурень можна враховувати шляхом модифікації граничної умови для радіальної хвильової функції електронів. Розраховано дійсну та уявну частини оптичної провідності еліптичних нанодротів. Методом функціонала густини обчислені енергії утворення моновакансій, а також енергії зв'язку, роботи виходу квазівільних, локалізованих позитрона і атома позитронію. Показано, що вакансії в приповерхневій області металів, для яких робота виходу позитрона негативна за знаком, можуть привести до зміни знаку роботи виходу. До такого ж ефекту зміни знаку роботи виходу приводить наявність діелектричного покриття на поверхні металу. Проведено порівняння з експериментами.

Реферат англійською:

Object of study - low-dimensional metallic systems, nanodefects in metals and open quantum dots. Purpose - to install a development elements of the theory, experimental studies and the construction of physical models of size effects in mesostructures. The structure and algorithm of the automated device for measuring the surface potential were developed. The device, that based on method of Kelvin, allows measuring superficial potential of metals and semiconductors as at normal room conditions so in vacuum chamber. A formula based on the free carriers gas model with parameters depending upon film thickness and frequency, in Drude approximation for the dielectric function is introduced to calculate infrared transmittance of metallic films of several nanometers thickness. Results of calculation are compared with experimental data for transmittance of Pb films of 0-5 nm thickness within the 1000-4000 cm-1 frequency range. It is found that an effective mass of charge carriers is noticeably less in a film than in a bulk metal. A frequency dependence of the relaxation rate and plasma frequency is discovered. TInfluence of the dielectric environment on dimensional Fermi energy oscillations of nanometer

metal films was investigated . The analytical expression for the dielectric function of the metal nano film was obtained . The influence of the geometry of the cross-section on the energy characteristics of 1D- metal systems was investigated . Size dependence of the Fermi energy of circular and elliptical nanowires was obtained . Changing the shape of the cross-section nanowires in the first order of perturbation theory can be taken into account by modifying the boundary condition for the radial wave function of electrons. The real and imaginary parts of the optical conductivity elliptical nanowires was calculated . Algorithm for calculating the S-matrix for electron motion in one-dimensional potential profiles of arbitrary shape has been developed. Poles of the S-matrix, and the broadening of the resonance energy levels of quasi-stationary cylindrical quantum dot in an external electric field were calculated. Theory of single-electron tunneling current-voltage characteristics and open metal quantum dot based on the broadening of the levels have been modified. In the framework of the density-functional-theory and direct variational method the energy formation of monovacancy, the binding energy, and the work functions of quasifree and localized positron and positronium atom has been calculated. It is shown that the vacancies into the subsurface region of the metals with negative positron work function can lead to the change in the sign of the work function. The dielectric coating of the metal surface leads to the change in the sign of the quasifree positron work function too. We compare these results with available experimental data.

Індекс УДК: 539.21:537.1;548:537.1;538.95-405:537.1, 539.21

Коди тематичних рубрик: 29.19.23

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)

IX. Бібліографічний опис

1.Бабич, А.В. Квантовая металлическая пленка в диэлектрическом окружении [Текст] /А.В.Бабич, В.В.Погосов // Физика твердого тела.- 2013.- Т.55.- №1.- С.177-185. 2.Погосов, В.В. Влияние сил изображения на характеристики метал-диэлектрических сандвичей [Текст] / В.В.Погосов, П.В.Вакула,А.В.Бабич // Физика твердого тела.- 2013.- Т. 55.- № 10.- С. 2004-2007. 3.Babich, A.V. Self-consistent calculations of work function, Shottky barrier heights and surface energy of metal nanofilms in dielectric confinement [Текст]/A.V.Babich, V.V.Pogosov, P.V.Vakula // Радіоелектроніка, інформатика, управління.- 2013.-№2.- С. 1-10. 4. Жавжаров, Є.Л. Некоторые особенности поведения водорода в кристаллическом кремнии [Текст] / Е.Л.Жавжаров, Т.В.Критская, В.М.Матюшин, Ю.М.Чащинов // Металургія.-2013.-№2(30).-С.137-145. 5. Kurbatsky, V.P. Infrared transmittance of Pb nanofilms [Текст] /Kurbatsky V.P., Babchenko I.A. //Physics and technology of thin films and nanosystems. XIV International conference (May, 20-25, 2013). Ivano-Frankivsk.-2013.-P.302. 6.Жавжаров, Є.Л. Автоматизована установка контролю поверхні напівпровідників і металів [Текст] /Є.Л.Жавжаров, В.М.Матюшин // Тези доповідей III Міжнар. наук.-техн. конф. "Функциональные и конструкционные материалы", 11-14 листопада 2013, м.Донецьк.- С. 86. 7.Погосов, В.В. On the positron diagnostics for metal defects and metal-dielectric sandwiches [Текст]/ В.В.Погосов, А.В.Бабіч, П.В.Вакула // Тези доповідей III Міжнар. наук.-техн. конф. "Функциональные и конструкционные материалы", 11-14 листопада 2013,

м.Донецьк.- С. 87. 8.Коротун, А. В. О влиянии квантово-размерных эффектов на оптическое поглощение металического композита // Физика металлов и металловедение (Єкатеринбург). - 2014.- Т. 56.- №5. (прийнято до друку) 9.Бабич, А.В. О вакансии в металле /А.В.Бабич, П.В.Вакула, В.В.Погосов // Физика твердого тела.- 2014. (прийнято до друку) 10.Бабич, А.В. К расчету энергетических характеристик металлической пленки с диэлектрическим покрытием // Физика металлов и металловедение (Єкатеринбург).- 2014.- Т.115, № 2, С. 1-10. (прийнято до друку) 11.Babich, A.V. On the of work function and Shottky barrier heights of metal nanofilms in dielectric confinement //Український фізичний журнал (прийнято до друку). 12.Курбацький В.П. О размерной и частотной зависимости коэффициента пропускания нанометровых пленок свинца //Физика твердого тела (надіслано до друку) 13.Коротун, А. В. Энергия Ферми металлической нанопроволочки эллиптического сечения //Физика твердого тела (надіслано до друку)

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Внуков Юрій Миколайович

Перелік осіб-виконавців

Бабіч А.В.

Булатецька Т.В.

Вакула П.В.

Жавжаров Є.Л.

Качан В.О.

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

