

## **Керування властивостями матеріалів в екстремальних умовах та поблизу фазових переходів**

Брик Т.М., Козловський М.П., Пелетминський О.С., Плевачук Ю.О.,  
Рудь О.Д., Склярчук В.М., Слюсаренко Ю.В., Сотніков А.Г.

### **Реферат**

Тематика досліджень циклу робіт, що висувається авторським колективом на здобуття Премії, об'єднується поняттям явища фазового перетворення у фізичній системі, тобто, переходу системи від одного фазового стану до іншого внаслідок зміни керуючих поведінкою системи чинників, наприклад, температури, тиску, впливу зовнішніх полів тощо. Умови існування системи в околі точок фазового переходу (критичних точок) самі по собі вже є екстремальними внаслідок особливого характеру критичної поведінки. Іноді ці точки називають також точками катастроф, оскільки в їхньому околі руйнується один і формується інший фазовий стан системи. Крім того, саме виникнення й існування нової фази в системі зазвичай стає можливим тільки за певних екстремальних умов. Такі умови пов'язані з надвисокими тисками чи наднизькими температурами середовища, характерними величинами діючих полів. В нових фазових станах, що виникають у середовищах за згаданих екстремальних умов, системи можуть демонструвати дивовижні, зовсім нові й незвичні властивості, особливо у безпосередньому околі критичних точок. Такі властивості викликають інтерес не лише з точки зору академічної науки, але і з точки зору можливих застосувань для створення якісно нових матеріалів.

Фундаментальні та прикладні дослідження, результати яких об'єднані в пропонованому циклі робіт, мають комплексний характер, що полягає у поєднанні трьох основних способів пізнання фізичних явищ: (і) використання прецизійних експериментальних досліджень в екстремальних термодинамічних умовах, виконаних у вітчизняних та зарубіжних лабораторіях, що забезпечує практичне використання отриманих результатів (іі) мікроскопічних теорій, де властивості речовини визначаються аналітично на основі інформації про взаємодії між частинками; (ііі) методик першопринципного комп'ютерного моделювання, які дозволяють максимально враховувати різні типи взаємодій.

Цикл робіт охоплює комплексне дослідження різних за типом фазових перетворень у складних фізичних системах, у широких діапазонах керуючих параметрів, таких, як концентрація, температура, тиск та зовнішнє поле. У цьому сенсі примітною об'єднуючою рисою низки досліджень та результатів, включених до циклу, є опис фазових переходів в системах, утворених одними й тими ж атомами, але при значних відмінностях керуючих параметрів. Яскравою ілюстрацією слугують системи, складені з атомів лужних металів (зокрема, рубідію), які демонструють дивовижні властивості, пов'язані з фазовими

перетвореннями, як за наднизьких температур (менше сотні нанокельвінів, явища в бозе-ейнштейнівському конденсаті в парах атомів рубідію) (Ю. Слюсаренко, О. Пелетминський, А. Сотніков), так і при температурах порядку п'ятисот кельвінів і високих тисках, наприклад, виявлений структурний перехід в розплавах Rb вище кривої плавлення при тисках порядку 12 Гпа (Т. Брик).

Значна частина робіт циклу пов'язана із дослідженнями ефектів та явищ у системах із бозе-ейнштейнівським конденсатом (БЕК) атомів та фотонів. Бозе-ейнштейнівський конденсат атомів є станом речовини, перехід до якого (фазове перетворення) здійснюється за екстремальних умов (наднизькі температури). Це явище лежить в основі багатьох фізичних ефектів, таких як надплинність чи надпровідність. Конденсат Бозе-Ейнштейна є новим агрегатним станом речовини, який був теоретично передбачений Ейнштейном і Бозе в 1925 році. І тільки через 70 років такий стан речовини було досягнуто експериментально охолодженням газу атомів лужних металів до температур порядку 50 нанокельвінів (нобелівська премія з фізики у 2001 р). БЕК фотонів у рівновазі з речовиною (фарбником) експериментально був реалізований тільки у 2010 р., що науковою спільнотою розцінено як «величезний прорив».

Бозе-ейнштейнівська конденсація атомів стала яскравим проявом квантової природи речовини на макроскопічному рівні. Оскільки БЕК атомів реалізується за екстремальних умов (наднизьких температур), слід очікувати в ньому прояву різноманітних явищ і ефектів, спостереження яких за інших станів речовини є ускладненим або неможливим. Крім того, в останні роки БЕК інтенсивно використовують для моделювання різних процесів та явищ, властивих конденсованим системам, що не можуть безпосередньо реєструватися в умовах доступних нині експериментів. У зв'язку з цим авторами даного циклу (Ю. Слюсаренко, О. Пелетминський) виконані піонерські на той час дослідження із бозе-ейнштейнівської конденсації ідеального газу атомів з ненульовим спіном у зовнішньому магнітному полі. Передбачено можливість існування низки нових фаз у БЕК, пов'язаних саме з проявом на макрорівні наявності в атома спінового ступеня вільності.

До числа проявів дивовижності систем із БЕК належить також і явище екстремально сильного уповільнення світла у бозе-конденсаті атомів лужних металів. Зокрема, у 1999 році було опубліковано результати експериментів у Гарварді, де світло вдалося не тільки сповільнити до швидкості 17 метрів за секунду, тобто майже у 20 мільйонів разів, а й досягти повної його зупинки.

Виявлена екстремальна поведінка систем із бозе-конденсатом (які самі по собі є унікальними в силу екстремальних умов їх існування) неодмінно наштовхує на думку про можливе застосування зазначених явищ і ефектів у приладах і технологіях майбутнього. Однак для цього треба мати більш повну уяву про механізми таких явищ на квантово-механічному рівні. Маючи на меті таку задачу, автори (Ю. Слюсаренко, А. Сотніков) запропонували

нову першопринципну теорію послідовного опису явищ, пов'язаних із взаємодією атомів лужних металів за наднизьких температур (зокрема, в стані з БЕК) із електромагнітним полем. Підхід базується на новому формулюванні методу вторинного квантування за можливості утворення зв'язаних станів частинок. У рамках розробленого підходу побудовано мікроскопічну теорію сильного уповільнення електромагнітних хвиль слабкої інтенсивності у бозе-конденсаті парів лужних металів. Визначено умови спостереження уповільнення електромагнітних сигналів мікрохвильового діапазону спектра в бозе-конденсаті. Уперше досліджено залежність параметрів поширення електромагнітного сигналу в атомарному БЕК від напруженості зовнішнього сталого магнітного поля. Запропоновано й теоретично обґрунтовано методику керування груповою швидкістю світла в бозе-конденсаті за допомогою зовнішнього однорідного магнітного поля.

Авторами вперше вивчено особливості бозе-конденсації фотонів, що знаходяться в термодинамічній рівновазі з розрідженими газами атомів лужних металів як за високих (аж до деяких видів ідеальної плазми), так і за наднизьких температур, коли можливе співіснування бозе-конденсатів атомів і фотонів. В обох випадках досліджено (аналітично та чисельно) поведінку густини конденсату фотонів залежно від температури. Запропоновано пояснення явища зупинки світла у бозе-конденсаті атомів унаслідок виявленого авторами явища «лавиноподібної» конденсації фотонів. Вказано на парадоксальну можливість інверсної заселеності атомних рівнів у разі зниження температури.

Оскільки БЕК є когерентним станом речовини, атоми якої коливаються в унісон, вважається, що БЕК може стати основою для пристроїв, аналогічних лазерам. Такі пристрої будуть атомними або речовинними лазерами, «побудованими» із БЕК-атомів. Крім того, БЕК є об'єктом, у якому може бути реалізована так звана «квантова телепортація без заплутування станів», у даному випадку – квантова телепортація між світлом – носієм інформації та атомами, що перебувають у стані з БЕК.

Авторами циклу (Ю.Слюсаренко, А. Сотніков) у роботах вказано також на те, що явище сильного уповільнення світла в бозе-ейнштейнівському конденсаті атомів лужних металів може бути використане для створення надчутливих оптичних перемикачів для покращення спектральних характеристик оптичних сигналів (насправді, і невидимих діапазонів хвиль також), зокрема, для їхньої фільтрації. Доведено також, що ефект Черенкова в бозе-ейнштейнівських конденсатах придатний також для експериментального визначення низки спектральних характеристик атомів, таких як природна ширина рівнів енергетичного спектру. Явище БЕК фотонів має перспективу застосування при створенні пристроїв для фокусування й накопичення енергії в сонячних батареях за похмурої погоди.

З наявністю БЕК пов'язане також явище надплинності, що є наслідком фазового перетворення у системі та яскравим прикладом її екстремальної поведінки. Дивовижною особливістю надплинних рідин, що обертаються, є

те, що вони пронизані періодичним масивом вихрових ниток із квантованою циркуляцією. У роботах одного із авторів циклу (О. Пелетминський) побудовано феноменологічний лагранжیان, що дозволяє у бездисипативному наближенні одержати загальні гідродинамічні рівняння надплинної рідини з урахуванням ефектів пружності тривимірної ґратки. Виведено гідродинамічні рівняння надплинного квантового кристалу – стану речовини із порушеними водночас трансляційною та калібрувальною симетріями. Уперше знайдено релятивістсько-інваріантну форму таких рівнянь гідродинаміки. Ці рівняння можуть бути корисними при описі певних станів астрофізичних об'єктів (кваркова матерія в ядрах нейтронних зірок).

Іншим важливим напрямком досліджень критичної поведінки систем, результати яких наведено у циклі, є вивчення фазових перетворень у ферміонних системах, переважно в області наднизьких температур. А саме, авторами (Ю. Слюсаренко, О. Пелетминський) досліджено фазовий перехід фермі-рідини з нормального стану до стану, в якому спонтанно порушено обертальну симетрію в імпульсному просторі. У такій «екзотичній» фазі передбачено цікавий ефект надбання системою (наприклад, електронами в металах) спонтанної швидкості внаслідок зазначеного фазового переходу. Після передачі імпульсу від електронів до ґратки увесь зразок може набути швидкості. Цей ефект є аналогічним до ефекту Ейнштейна-де Гааза, при якому внаслідок намагнічування тіла (електрони при цьому набувають додаткового моменту кількості руху) в силу закону збереження моменту кількості руху тіло набуває кутової швидкості. Вивчено також нетрадиційний фазовий перехід у фермі-рідині з нормального стану до стану з просторово-періодичною структурою. Такий фазовий перехід може мати прямий стосунок до так званої вігнерівської кристалізації електронної підсистеми в металах.

Наступний напрям досліджень одного із авторів циклу (А. Сотніков) пов'язаний із попереднім напрямом як системами, що розглядаються, так і станами в них, що виникають унаслідок фазових перетворень і є можливими лише за екстремальних умов. Досліджуються системи багатьох тотожних ферміонів за наднизьких температур при, зокрема, досягненні режиму магнітного впорядкування фермі-атомів в оптичних ґратках. Такі системи зараз активно вивчаються як кандидати на роль структурного елемента оперативної пам'яті квантових комп'ютерів. Зазначений погляд на ферміонні системи за наднизьких температур виникає у зв'язку з великим часом когерентності таких систем у порівнянні, наприклад, із джозефсонівськими контактами у надпровідниках. Також системи, що складаються з ультрахолодних атомів в оптичних ґратках, дуже важливі з академічної точки зору, оскільки відкривають можливість більш глибокого та всебічного вивчення фазових переходів від стану фермі-рідини до ізолятора Мотта, топологічних станів матерії та механізмів порушення високих спінових симетрій, що відіграють одну з вирішальних ролей у фізиці конденсованого стану та фізиці високих енергій. Наразі основною

перепорою у використанні в повному обсязі ультрахолодних газів ферміонів для квантових обчислень є наявна висока ентропія атомних сумішей. Тобто, незважаючи на приголомшливий прогрес в області лазерного охолодження атомів, ультрахолодні гази ферміонів є поки що надто гарячими об'єктами для спостереження таких ефектів дальнього порядку, як магнітне упорядкування та надплинність. Отже, важливо не лише виявити шляхи зменшення ентропії в наявних сумішах, але й віднайти потенціальні конфігурації систем, де потрібні квантові ефекти можна отримати за існуючих характеристик охолоджених газів.

Значну частину циклу робіт присвячено експериментальним та теоретичним дослідженням систем, у яких фазові переходи та критичні явища спостерігаються в екстремальних термодинамічних умовах (Ю. Плевачук, В. Склярчук). До такої групи об'єктів належать рідкі метали та напівпровідники, і, згідно з класифікацією академіка Л. Булавіна, формують клас іонно-електронних рідин, які належать до невпорядкованих середовищ. На нинішньому етапі досліджень невпорядкованого стану речовини наявний значний теоретичний і експериментальний матеріал, якого, однак, недостатньо не тільки для завершення побудови загальної теорії, але і для формування окремих цілісних концепцій стосовно іонно-електронних рідин. Надійним способом отримання достовірних результатів залишається саме експеримент. Це і зумовило інтерес до експериментального вивчення переходу метал–неметал у системах на основі телуру і селену за зміни температури і концентрації. Досліджені матеріали є придатними для застосування у металургії, приладо- та машинобудуванні, космічній техніці, або як матриці дисперсійних сумішей у напівпровідниковому приладобудуванні. Окрема галузь застосування – атомна енергетика, де досліджувані матеріали можуть бути використані як різноманітні сенсори та теплоносії для реакторів четвертого покоління.

Виявлено, що не існує єдиного підходу до аналізу електронних властивостей розплавів Tl-Se з надлишком селену або талію відносно  $Tl_2Se$ . Для концентрацій з надлишком селену встановлено, що вихідна матриця може бути легована Se, який створює акцепторні рівні. Концентрація з надлишком Tl попадає в область обмеженої розчинності компонентів, для якої відзначено суттєву зміну в значеннях електропровідності співіснуючих рідин за фазового переходу – розшарування. Сукупний аналіз поведінки електропровідності і термо-е.р.с. дозволяє припустити, що за низьких температур (<1000 K) відбувається тунелювання електронів у вузькій домішковій зоні. У системі в околі стехіометричної концентрації CdTe за зміни концентрації легуючого елемента, а також за зростання температури рівень Фермі зміщується ближче до середини псевдощілини. У цьому випадку вклади в електропровідність можуть давати обидві зони – зона провідності і валентна зона. Тоді за малих значень електропровідності можуть бути і малі значення термо-е.р.с., що і спостерігаємо на температурних і концентраційних залежностях досліджених властивостей. У розплавах Sb і Bi домішки перехідних металів (до 3 ат.%) зменшують

електропровідність, за виключенням Ni і Cu, які незначно збільшують електропровідність рідкого Sb. Показано, що стан електронів провідності трансформується внаслідок s-d резонансу. У цьому випадку, швидкість зміни густини станів на віртуальних рівнях визначає збільшення або зменшення додаткової провідності.

Модель незалежних зв'язків у рідкому телури вказує на існування ланцюжків різної довжини з розірваними зв'язками на краях. Така модель передбачає молекулярну конфігурацію з двома направленими зв'язками. Однак, структурні дослідження виявили стійку конфігурацію з трьома направленими зв'язками. Експериментальні результати вимірів в'язкості рідкого телуру з домішками 3d перехідних металів демонструють, що незначні (до 3 ат.%) домішки перехідного металу збільшують в'язкість до 50%. Температурна залежність в'язкості телуру передбачає можливість формування ланцюгової структури в процесі плавлення. Показано, що додавання 3d металу зі складною зовнішньою електронною конфігурацією приводить до деякого відновлення зруйнованих зв'язків і зумовлює утворення комплексів, які в свою чергу приводять до зростання в'язкості. (Ю.Плевачук, В.Склярчук).

Фазові переходи першого та другого (в околі критичної точки розшарування) роду за високих температур у багатокомпонентних монотектичних та евтектичних металевих системах є об'єктом інтенсивних досліджень, актуальність яких підтверджено ще в 60-і роки ХХ століття результатами теоретичного аналізу спеціалістів NASA. Такі системи мають складний енергетичний спектр, де помітну або домінуючу роль в околі критичної точки відіграє електронна підсистема, а електрофізичні та структурно-чутливі властивості помітно змінюються під дією зовнішніх термодинамічних параметрів. Аналіз засвідчив, що на основі монотектичних систем може бути створений ряд нових композиційних матеріалів спеціального призначення: антифрикційних зносостійких, електротехнічних, магнітних. Серед інших важливих застосувань таких матеріалів – радіаційний захист конструкційних матеріалів унаслідок рівномірного розподілу за об'ємом або в поверхневому шарі включень свинцю й інших легкоплавких елементів; тепловий захист конструкцій, що працюють за підвищених температур (W–Cu) тощо. З іншого боку, евтектичні системи на базі Sn є основою для незабруднюючих та екологічно безпечних безсвинцевих припоїв, що використовують в електронній промисловості та побутовому приладобудуванні (Sn–Cu, Sn–Ag, Sn–Sb, Sn–Bi).

За результатами унікальних експериментальних досліджень таких систем, проведених як у лабораторних умовах, так і в умовах мікрогравітації під час параболічних польотів авторами встановлено закономірності поведінки теплофізичних властивостей монотектичних металевих розплавів у концентраційно-температурному інтервалі обмеженої розчинності компонентів та в разі мікророзшарування евтектичних розплавів. Практична цінність робіт (Ю. Плевачук,

В. Склярчук) полягає в тому, що досліджені монотектичні системи можуть розглядатися як перспективні матеріали для дрібнодисперсних сумішей, зокрема самозмащувальних підшипників ковзання з низькими коефіцієнтом тертя та зношуванням для автомобільної промисловості.

Всебічно досліджені евтектичні системи на основі олова дедалі ширше використовують як екологічно безпечні безсвинцеві припої у мікроелектроніці та побутовій техніці. Угода про асоціацію між Україною та ЄС дає змогу перейти до економічної інтеграції, яка передбачає перехід на Європейські стандарти. Це означає, що, згідно з законодавством ЄС використання безсвинцевих припоїв замість традиційних Sn-Pb стане обов'язковим. У зв'язку з цим, розгортання вітчизняного виробництва безсвинцевих припоїв може бути економічно вигіднішим, ніж імпорт закордонних аналогів. Особливу цінність становлять нещодавно отримані результати, що відображають вплив різних домішок наночастинок (керамічні, металеві, біметалеві, графітові нанотрубки) на механічні та електрофізичні властивості безсвинцевих припоїв. Практична користь таких матеріалів полягає також у тому, що вони не передбачають подальшої утилізації після використання. Досліджені авторами евтектичні системи на основі свинцю можуть бути застосовані як рідкометалеві теплоносії атомних реакторів четвертого покоління.

Новим важливим напрямком досліджень та верифікації аналітичних підходів є першопринципне (*ab initio*) поєднання статистичної механіки атомів з функціоналом електронної густини для моделювання фізико-хімічних процесів на мікроскопічному рівні. Першопринципне – тому що електронна підсистема, яка відповідає за утворення хімічних зв'язків у речовині, розраховується на квантовому рівні без жодних модельних припущень. Важливою перевагою першопринципного комп'ютерного моделювання є можливість досліджувати тверді тіла, рідини, складні молекулярні системи в екстремальних умовах, для яких реальні експерименти є практично неможливі. Дослідження з використанням першопринципного комп'ютерного моделювання спрямовані на фундаментальні проблеми пошуку нових матеріалів, зокрема утворення металічного водню при високих тисках, встановлення особливостей атомістичної структури і, зокрема, гідратних оболонок складних молекулярних систем та з'ясування ролі електронної підсистеми в динаміці рідин з різним типом хімічного зв'язку.

На основі першопринципного моделювання (Т.Брик) вдалось встановити існування структурного переходу в розплаві металічного лужного металу. Широкий спектр різноманітних явищ, що спостерігаються у важких лужних металах типу Rb і Cs, пов'язаний із їх здатністю міняти ефективний радіус атомарних частинок, які зокрема при низьких та кімнатних температурах і нормальних тисках є сферичними частинками, а при високих тисках за рахунок часткового заповнення 5p- та 5d-орбіталей для Rb (чи 5p- та 5d-орбіталей для Cs) мають сильно несферично-симетричний розподіл електронної густини. Поєднуючи результати

першопринципної молекулярної динаміки та дані експериментів по непружному розсіюванні рентгенівських променів для розплаву Rb при високих тисках вперше встановлено наявність структурного переходу вище кривої плавлення при тисках порядку 12 ГПа. Перехід метал-неметал при високих тисках був встановлений на основі першопринципного моделювання бінарного еквімолярного розплаву Cs-Au. Було отримано, що неметалічний основний стан при нормальному тиску в еквімолярному розплаві Cs-Au змінюється металічним станом при прикладанні тиску порядку 3 ГПа (Т. Брик).

Задачею, важливою для геофізики, є встановлення низького значення модуля зсуву заліза при тисках та температурах, характерних для внутрішньої оболонки ядра Землі. Отримано вираз для двочасової релаксації зсувного напруження заліза. Показано, що аналітична модель добре описує спостережувану у комп'ютерному моделюванні двочасову релаксацію зсувного напруження заліза при надвисоких тисках та температурах (Т. Брик).

Вплив високих тисків на нові явища в динаміці металічних розплавів було продемонстровано на прикладі ab initio моделювання розплавів Li. При високих тисках порядку 60 ГПа встановлено появу нових високочастотних поперечних короткохвильових збуджень. (Т.Брик).

Використовуючи моделювання методом молекулярної динаміки з першопринципними ефективними потенціалами взаємодії вперше пояснено явище «швидкого звуку» в металічних бінарних розплавах із високою різницею в масах компонент. Аналіз часових кореляційних функцій, отриманих за допомогою методу знаходження власних динамічних мод узагальненого рівняння Ланжевена та їх вагових внесків у динаміку дозволив встановити природу збуджень типу «швидкого звуку» (Т.Брик).

Першопринципне комп'ютерне моделювання розплавів C-O-H-Fe дозволило встановити важливу роль атомів заліза як каталізаторів синтезу важких гідрокарбонатів при високих тисках і температурах, характерних для границі розділу ядро Землі-мантія. Цей результат є актуальний для розуміння геофізичних процесів та обґрунтовує можливість синтезу високомолекулярних сполук у контакті з залізом при високих тисках, які є супутніми продуктами утворення нафти (Т. Брик).

Мікроскопічні підходи до побудови теоретичного опису властивостей речовин, методик комп'ютерного моделювання та прецизійні експерименти, запропоновані та реалізовані авторами, дозволили об'єднати низку вагомих результатів як фундаментального, так і прикладного характеру. М.Козловським виконано цикл робіт з розвитку методу опису фазових переходів та критичної поведінки тривимірних магнітних систем, який успішно застосовується при дослідженні фазових переходів першого та другого родів. Запропонований метод дозволяє передбачати поведінку тривимірних систем поблизу точки фазового переходу на мікроскопічному рівні опису. Отримане авторами представлення рекурентних співвідношень у вигляді неасимптотичних рядів дозволило уникнути використання



традиційної теорії збурень, яка приводить до виникнення нефізичних розбіжностей низки фізичних характеристик модельних систем магнетиків.

Встановлено спільні та відмінні риси запропонованого методу опису критичної поведінки системи із відомим підходом К. Вільсона, який був удостоєний у 1983 році Нобелівської премії у галузі фізики. Спільним в обох підходах є реалізація на мікроскопічному рівні ідеї масштабної інваріантності, запропонованої Л. Кадановим. В роботах К. Вільсона це зроблено з використанням гаусового розподілу флуктуацій, а в працях М. П. Козловського – на базі негаусового розподілу флуктуацій, що дозволило уникнути проблем, пов'язаних із нефізичними розбіжностями фізичних величин, та запропонувати теорію, яка дає кількісний опис фазового переходу на прикладі тривимірної магнітної системи. М. П. Козловським запропоновано системний підхід до розрахунку як універсальних величин (критичні показники, відношення критичних амплітуд та ін.), так і неуніверсальних характеристик фізичних систем: вільної енергії, ентропії, а також проведено розрахунок теплоємності, середнього спінового моменту, сприйнятливості магнітних систем тощо. Перевагою розвинутого методу є можливість отримати аналітичні вирази для неуніверсальних характеристик як функцій мікроскопічних параметрів системи. Цей метод виявився ефективним при описі фізичних властивостей широкого класу тривимірних магнітних систем поблизу точки фазового переходу, тривимірних магнітних систем з багатокомпонентним параметром порядку.

Теорія фазових переходів узагальнена М. П. Козловським на випадок наявності в магнетиках зовнішнього магнітного поля. Розвинутий ним теоретичний підхід дозволив дослідити поблизу точки фазового переходу залежності термодинамічних характеристик тривимірних статистичних моделей магнетиків як від температури та зовнішнього поля, так і від мікроскопічних параметрів системи. Ним вперше запропоновано рівняння стану 3D ізінгоподібної системи, в якому розраховано явний вигляд скейлінгової функції. Протягом останніх років ним розвинуто новий підхід до вивчення фазової поведінки неперервних систем взаємодіючих частинок, зокрема, отримано точні розв'язки задачі про фазовий перехід першого роду в неперервній системі з потенціалом Кюрі-Вейса, а також неперервної двокомпонентної моделі Відома-Ролінгстона (Widom-Rowlinson).

Один із авторів (О. Д. Рудь) в циклі робіт вивчив зміни в атомній будові графіту як модельного матеріалу в процесі квазінеперервного структурного перетворення від кристалічного до аморфного стану під час його високоенергетичного оброблення в кульовому млині. Методом високоенергетичної механоактиваційної обробки графіту в планетарному млині експериментально отримано вуглецевий наноматеріал (ВНМ), який можна описати як локальні гетероалотропні структури вуглецю, і які характеризуються одночасною присутністю в структурі матеріалу декількох типів ближнього атомного порядку без явної міжфазної межі. У процесі механоактиваційної обробки локальні температура і тиски в місцях контакту

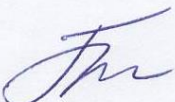
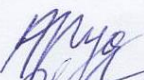

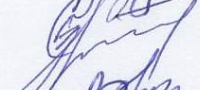

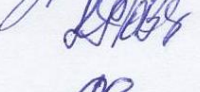


тіл, що мелють, досягають значень  $T \geq 10^3$  К,  $P \sim 5$  ГПа за час взаємодії  $\tau \sim 10^{-8}$  с. Це приводить до сильного локального спотворення кристалічної структури вихідних матеріалів аж до виникнення аморфного стану, фазових перетворень в цих місцях і враховуючи надшвидкий час взаємодії, що є аналогом надшвидкого загартування, можливість отримання і фіксації нових метастабільних станів і сполук, які не можна отримати традиційними металургійними методами.

За допомогою рентгенівських дифракційних методів та електронної мікроскопії високої роздільної здатності, моделювання атомної будови оберненим методом Монте Карло та статистичного аналізу ближнього атомного порядку поліедральним методом Вороного-Делоне досліджено структурний стан сильно розупорядкованого вуглецевого наноматеріалу. Побудовані поліедри Вороного (ПВ) характеризуються широким розподілом топологічних та метричних характеристик, що свідчить про неоднорідність атомної будови синтезованого вуглецевого наноматеріалу, причому координаційні поліедри відрізняються неправильною геометричною формою та характеризуються переважною більшістю 5-ти куткових граней, притаманних аморфним і неупорядкованим матеріалам.

Важливою, з точки зору практичного використання, є зміна поведінки розподілу коефіцієнту сферичності  $P(K_{\text{sph}})$  ПВ ( $K_{\text{sph}} = 36\pi V^2/S^3$ , де  $V$  і  $S$  – об'єм і площа ПВ, відповідно) в процесі неперервного структурного переходу вуглецю від кристалічного до аморфного стану при механоактивційній обробці графіту, яка може бути ключовою характеристикою, що описує трансформацію атомної будови графіту в аморфний стан. Знайдено нові локальні структури вуглецю, які можна охарактеризувати як двошаровий, або бі-графіт. Відстань в середині бі-шарів графенових площин складає  $\sim 0.9-1.2$  Å, що суттєво менше властивих алмазу, графіту та карбіну, в той же час відстань між бі-шарами відповідає графіту.

В працях О.Рудя розроблені також фізичні принципи і створені нові водневосорбційні матеріали на основі механоактивованих нанокмполімерів Mg з добавками різних алотропних форм вуглецю для зберігання водню в твердому стані для потреб екологічно-чистої водневої енергетики, які задовольняють умовам їх промислового використання за критеріями міністерства енергетики США – не менше 5 ваг.% сорбованого водню, температура сорбції до 150 °С, здатність до багатократного реверсного циклування сорбції-десорбції.

АВТОРИ:

|   |                      |  |                   |
|---|----------------------|--|-------------------|
|  | (Брик Т.М.)          |  | (Рудь О.Д.)       |
|  | (Козловський М.П.)   |  | (Склярчук В.М.)   |
|  | (Пелетминський О.С.) |  | (Слюсаренко Ю.В.) |
|  | (Плевачук Ю.О.)      |  | (Сотніков А.Г.)   |