

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE
Odessa I. I. Mechnikov National University

**СЕНСОРА
ЕЛЕКТРОНІКА
І МІКРОСИСТЕМНІ
ТЕХНОЛОГІЇ
2017 — Т. 14, № 3**

**SENSOR
ELECTRONICS
AND MICROSYS-
TEM TECHNOLOGIES
2017 — VOL. 14, № 3**

Науково-технічний журнал

Scientific and Technical Journal

Заснований 13.11.2003 року.
Виходить 4 рази на рік

It is based 13.11.2003 року.
The Journal issue four times a year

УДК 681.586

UDC 681.586

Засновник Одеський національний
університет імені І. І. Мечникова

Founded by Odessa I. I. Mechnikov
National University

За підтримки Українського фізичного товариства

At support of the Ukrainian Physical Society

Свідоцтво про державну реєстрацію КВ № 8131

Certificate of State Registration KB № 8131

Журнал входить до переліку фахових видань
ВАК України з фізико-математичних,
технічних та біологічних наук

The Journal is a part of list of the issues
recommended by SAK of Ukraine on physical and
mathematical, engineering and biological sciences

Журнал реферується РЖ «Джерело»
і ВІНІТІ (Росія), включено в міжнародні бази
Index Copernicus, РІНЦ, наукова електрон-
на бібліотека Cross Ref. Elibrary, Directory of
Research Journal Indexing, General Impact Factor

The Journal is reviewed by RJ «Djerelo»
and RJ ICSTI (Russia), is included in the
International Base Index Copernicus, RSCI,
Cross Ref. Elibrary, Directory of Research
Journal Indexing, General Impact Factor

Видається за рішенням Вченої ради
Одеського національного університету
імені І. І. Мечникова
Протокол № 1 від 19.09.2017 р.

Publishes on the resolution of Odessa
I. I. Mechnikov National University
Scientific Council. *Transaction № 1,
19, September, 2017*

Адреса редакції:
вул. Дворянська, 2, МННФТЦ (НДЛІ-3),
Одеський національний університет
імені І. І. Мечникова, Одеса, 65082, Україна.
Тел./Факс: +38(048)723-34-61

Editorial address:
2, Dvoryanskaya Str., ISEPTC (RL-3),
Odessa I. I. Mechnikov National University,
Odessa, 65082, Ukraine.
Ph./Fax: +38(048)723-34-61

Редакційна колегія

Головний редактор – **В. А. Сминтина**
Заступник головного редактора – **Я. І. Лепіх**
А. П. Балабан (Одеса, Україна)
відповідальний секретар

О. Є. Беляєв (Київ, Україна)
І. В. Блонський (Київ, Україна)
В. Г. Вербицький (Київ, Україна)
Б. М. Галкін (Одеса, Україна)
Ю. В. Гуляєв (Москва, Росія)
Ю. О. Гунченко (Одеса, Україна)
А. Д'Аміко (Рим, Італія)
Н. Джафрезік Рене (Ліон, Франція)
С. В. Дзядевич (Київ, Україна)
Г. В. Єльська (Київ, Україна)
В. О. Іваниця (Одеса, Україна)
О. М. Калашніков (Ноттінгем, Велика Британія)
В. П. Кожемяко (Вінниця, Україна)
І. А. Кравченко (Одеса, Україна)
Є. Д. Крушкін (Іллічівськ, Україна)
Вільхо Лантто (Оулу, Фінляндія)
В. Г. Литовченко (Київ, Україна)
С. В. Ленков (Київ, Україна)
Є. В. Малахов (Одеса, Україна)
І. Г. Неизвестний (Новосибірськ, Росія)
О. О. Птащенко (Одеса, Україна)
Д. Д. Ряботягов (Одеса, Україна)
С. М. Рябченко (Київ, Україна)
О. П. Солдаткін (Київ, Україна)
М. Ф. Стародуб (Київ, Україна)
Й. М. Стахіра (Львів, Україна)
М. В. Стріха (Київ, Україна)
О. В. Третяк (Київ, Україна)
А. Чаудхрі (Чандігар, Індія)

Editorial Board

Editor-in-Chief – **V. A. Smyntyna**
Vice Editor-in-Chief – **Ya. I. Lepikh**
A. P. Balaban (Odessa, Ukraine)
responsible editor

A. E. Belyaev (Kiev, Ukraine)
I. V. Blonskii (Kiev, Ukraine)
V. G. Verbitsky (Kiev, Ukraine)
B. M. Galkin (Odessa, Ukraine)
Yu. A. Gulyaev (Moscow, Russia)
Yu. O. Gunchenko (Odessa, Ukraine)
A. D'Amiko (Rome, Italy)
N. Jaffrezik Renault (Lyon, France)
S. V. Dzyadevych (Kiev, Ukraine)
G. V. Elskaya (Kiev, Ukraine)
V. O. Ivanytsia (Odessa, Ukraine)
O. M. Kalashnikov (Nottingham, United Kingdom)
V. P. Kozemyako (Vinnitsa, Ukraine)
I. A. Kravchenko (Odessa, Ukraine)
E. D. Krushkin (Illyichevsk, Ukraine)
Vilho Lantto (Oulu, Finland)
V. G. Litovchenko (Kiev, Ukraine)
S. V. Lenkov (Kiev, Ukraine)
E. V. Malakhov (Odessa, Ukraine)
I. G. Neizvestny (Novosibirsk, Russia)
A. A. Ptashchenko (Odessa, Ukraine)
D. D. Ryabotyagov (Odessa, Ukraine)
S. M. Ryabchenko (Kiev, Ukraine)
A. P. Soldatkin (Kiev, Ukraine)
N. F. Starodub (Kiev, Ukraine)
J. M. Stakhira (Lviv, Ukraine)
M. V. Strikha (Kiev, Ukraine)
A. V. Tretyak (Kiev, Ukraine)
A. Chaundhri (Chandigarh, India)

Науковий редактор випуску
та відповідальний за випуск – **Я. І. Лепіх**

ЗМІСТ

CONTENS

Фізичні, хімічні та інші явища, на основі яких можуть бути створені сенсори
Physical, chemical and other phenomena, as the bases of sensors

Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha

COULOMB BLOCADE AND SINGLE-ELECTRON TRANSISTOR WITHIN “BOTTOM – UP” APPROACH IN MODERN NANO-ELECTRONICS AND WITHIN TRADITIONAL “UP – BOTTOM” CONCEPT... 5

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

КУЛОНІВСЬКА БЛОКАДА ТА ОДНОЕЛЕКТРОННИЙ ТРАНЗИСТОР У РАМКАХ КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ» СУЧАСНОЇ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ ТА В ТРАДИЦІЙНІЙ КОНЦЕПЦІЇ «ЗГОРИ – ВНИЗ»

Проектування і математичне моделювання сенсорів
Sensors design and mathematical modeling

A. V. Glushkov, O. Yu. Khetselius, Yu. Ya. Bunyakova, V. V. Buyadzhi, Yu. V. Dubrovskaya, A. A. Kuznetsova

NEW APPROACH AND MICROSYSTEM TECHNOLOGY OF ADVANCED NON-LINEAR ANALYSIS AND MODELLING CHAOTIC ENVIRONMENTAL RADIOACTIVITY DYNAMICS..... 24

О. В. Глушков, Ю. Я. Бунякова, В. В. Буяджи, Ю. В. Дубровська, Г. О. Кузнецова, О. Ю. Хежеліус

НОВИЙ ПІДХІД І МІКРОСИСТЕМНА ТЕХНОЛОГІЯ ВДОСКОНАЛЕНОГО НЕЛІНІЙНОГО АНАЛІЗУ І МОДЕЛЮВАННЯ ХАОТИЧНОЇ ДИНАМІКИ КОНЦЕНТРАЦІЙ

РАДІОНУКЛИДІВ У НАВКОЛИШНЬОМУ СЕРЕДОВИЩУ

Оптичні, оптоелектронні і радіаційні сенсори
Optical and optoelectronic and radiation sensors

I. O. Lysiuk, A. G. Golenkov, S. E. Dukhnin, V. P. Reva, A. V. Shevchik-Shekera, F. F. Sizov

A SUB-THz/THz RADIATION DETECTOR DEVICE BASED ON Si-MOSFET..... 38

И. А. Лысюк, А. Г. Голенков, С. Е. Духнин, В. П. Рева, А. В. Шевчик-Шекера, Ф. Ф. Сизов

ОДНОЭЛЕМЕНТНОЕ ПРИЕМНОЕ УСТРОЙСТВО ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ ИЗЛУЧЕНИЯ СУБ-ТГц/ТГц ДИАПАЗОНА НА ОСНОВЕ КРЕМНИЕВОГО ПОЛЕВОГО ТРАНЗИСТОРА

Акустоелектронні сенсори
Acoustoelectronic sensors

Ya. I. Lepikh

FORMATION OF THE DEVICES ON THE SAW CHARACTERISTICS BY A METHOD OF SELECTIVE POLARIZATION 47

Я. І. Леніх

ФОРМУВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПРИБОРІВ НА ПАХ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОЇ ПОЛЯРИЗАЦІЇ

Матеріали для сенсорів
Sensor materials

I. V. Horichok, I. M. Lischynskyy, S. I. Mudryy, A. S. Oberemok, T. O. Semko, I. M. Hatsevych, O. M. Matkivskyy, G. D. Mateyik, R. O. Dzumedzey

TECHNOLOGICAL ASPECTS OBTAINING OF THE THERMOELECTRIC PbTe..... 53

*I. В. Горічок, I. М. Ліщинський, С. I. Мудрий,
О. С. Оберемок, Т. О. Семко, I. М. Хацевич,
О. М. Матківський, Г. Д. Матеїк,
Р. О. Дзумедзей*

ТЕХНОЛОГІЧНІ АСПЕКТИ ОТРИМАННЯ
ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОГО РbTe

**Сенсори та інформаційні системи
Sensors and information systems**

*Yu. Ya. Buniakova, A. V. Glushkov,
O. Yu. Khetselius, V. V. Buyadzhi,
A. V. Ignatenko, N. Bykowszczenko*

NEW APPROACH AND
MICROSYSTEM TECHNOLOGY
OF ADVANCED ANALYSIS AND
FORECASTING THE AIR POLLUTANT
CONCENTRATION TEMPORAL
DYNAMICS IN ATMOSPHERE
OF THE INDUSTRIAL CITIES 65

*Ю. Я. Бунякова, О. В. Глушков,
О. Ю. Хецеліус, Г. В. Ігнатенко,
Н. Биковицzenко, В. В. Буяджи*

НОВИЙ ПІДХІД І МІКРОСИСТЕМНА
ТЕХНОЛОГІЯ ВДОСКОНАЛЕНОГО
АНАЛІЗУ І ПРОГНОЗУ ЧАСОВОЇ
ДИНАМІКИ КОНЦЕНТРАЦІЙ
ЗАБРУДНЮЮЧИХ РЕЧОВИН В
АТМОСФЕРІ ПРОМИСЛОВИХ МІСТ

**Деградація, метрологія і сертифікація
сенсорів
Sensor's degradation, metrology and
certification**

O. Kochan

THEORETICAL FUNDAMENTALS OF
ESTIMATION OF THERMOCOUPLE LEG
CONDITIONS DURING OPERATION

O. Kochan

ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ОЦІНКИ СТАНУ
ЕЛЕКТРОДІВ ТЕРМОПАР У ПРОЦЕСІ
ЕКСПЛУАТАЦІЇ 79

**Рішення Міжнародної конференції з
інформаційно-телекомунікаційних
технологій та радіоелектроніки
(УкрМіКо'2017/UkrMiCo'2017)..... 91**

**Інформація для авторів.
Вимоги до оформлення
статей у журнал 94**

**Information for contributors. The
requirements on papers preparation..... 97**

ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

УДК 538.935+539.186 ; PACS numbers: 31.15.E-, 71.15.Mb, 85.30.Tv, 85.65.+h
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111403>

КУЛОНІВСЬКА БЛОКАДА ТА ОДНОЕЛЕКТРОННИЙ ТРАНЗИСТОР У РАМКАХ КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ» СУЧАСНОЇ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ ТА В ТРАДИЦІЙНІЙ КОНЦЕПЦІЇ «ЗГОРИ – ВНИЗ»

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

Одеський державний екологічний університет,
факультет комп'ютерних наук,
вул. Львівська, 15, Одеса, Україна
тел. (067) 725 2209, *E-mail: quantumnet@yandex.ua*
* Київський національний університет ім. Т. Шевченка,
факультет радіофізики, електроніки і комп'ютерних систем,
пр. Глушкова, 4г, Київ, Україна, тел. (044) 526 0532;
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України,
пр. Науки, 41, Київ, Україна, тел. (044) 525 6033,
E-mail: maksym_strikha@hotmail.com

КУЛОНІВСЬКА БЛОКАДА ТА ОДНОЕЛЕКТРОННИЙ ТРАНЗИСТОР У РАМКАХ КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ» СУЧАСНОЇ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ ТА В ТРАДИЦІЙНІЙ КОНЦЕПЦІЇ «ЗГОРИ – ВНИЗ»

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

Анотація. У методичній оглядовій статті, розрахованій на науковців, викладачів та студентів вищої школи, проаналізовано явище кулонівської блокади в одноелектронному транзисторі на одній молекулі з позицій двох різних підходів: в концепції «знизу – вгору» наноелектроніки і, для порівняння, в традиційній концепції «згори – вниз» з застосуванням макроскопічних властивостей і понять, як-от ємність провідного каналу тощо. В рамках побудованої елементарної теорії одноелектронного транзистора ми отримали чисельні оцінки для меж напруг, у яких можливе

перенесення струму з витоку на стік, а також умов і параметрів, за яких можливе експериментальне спостереження явища «кулонівської блокади», коли струм не протікає за ненульової напруги між витоком і стоком.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, кулонівська блокада, одноелектронний транзистор

COULOMB BLOCADE AND SINGLE-ELECTRON TRANSISTOR WITHIN “BOTTOM – UP” APPROACH IN MODERN NANOELECTRONICS AND WITHIN TRADITIONAL “UP – BOTTOM” CONCEPT

Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha

Abstract. In a tutorial review article directed to serve researchers, university teachers and students, Coulomb blockade in one-molecule single-electron transistor SET is discussed under the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics, and, for comparison, within the traditional “up-bottom” concept, using macroscopic characteristics, such as the capacitance of conducting channel etc. In a developed elementary theory of SET we obtained numeric estimations for limits of voltages for possible electronic transport from source to drain electrodes, as well as for conditions and parameters, under which experimental observation of Coulomb blockade effect with zero current through SET under non-zero voltage between source and drain is possible.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, Coulomb blockade, single-electron transistor SET

КУЛОНОВСКАЯ БЛОКАДА И ОДНОЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНЗИСТОР В РАМКАХ КОНЦЕПЦИИ «СНИЗУ – ВВЕРХ» СОВРЕМЕННОЙ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ И В ТРАДИЦИОННОЙ КОНЦЕПЦИИ «СВЕРХУ – ВНИЗ»

Ю. А. Кругляк, М. В. Стриха

Аннотация. В методической обзорной статье, рассчитанной на исследователей, преподавателей и студентов высшей школы, проанализировано явление кулоновской блокады в одноэлектронном транзисторе на одной молекуле с позиций двух разных подходов: в концепции «снизу – вверх» наноелектроники и, для сравнения, в традиционной концепции «сверху – вниз» с использованием макроскопических свойств и понятий, таких, как емкость проводящего канала и пр.. В рамках построенной элементарной теории одноэлектронного транзистора мы получили численные оценки для пределов напряжений, в которых возможен перенос тока от истока к стоку, а также условий и параметров, при которых возможно экспериментальное наблюдение явления «кулоновской блокады», когда ток не протекает при ненулевом напряжении между истоком и стоком.

Ключевые слова: нанофізика, наноелектроніка, кулоновська блокада, одноелектронний транзистор

1. Вступ

Продовжуючи знайомити вітчизняних викладачів, аспірантів і студентів, які читають курси або навчаються на різних спеціалізаціях фізичного й інженерного профілю, із сучасною концепцією «знизу-вгору» викладання фізики наносистем, автором якої є проф. Супрійо Датта (Supriyo Datta), до певної міри альтернативною традиційній, що відштовхується від розгляду аналогічних явищ у великих об'ємних провідниках, ми розглянули в [1] модель Ландауера – Датта – Лундстрома (ЛДЛ), яка вже знайшла широке застосування при аналізі як електронного, так і фононного транспорту в резисторах як нанорозмірних, так і довгих чи об'ємних.

При цьому розгляд у [1] здійснювався для випадку, коли температура контактів резистора однакова. У [2] натомість ми розглянули термоелектричні ефекти Зеєбека і Пельть'є в моделі ЛДЛ, а також якісно обговорили закон Відемана-Франца й основні рівняння термоелектрики з відповідними транспортними коефіцієнтами. Потому в [3] ми отримали доведення для результатів, постульованих у [2], причому зробили це для 1D, 2D и 3D провідників з довільним законом дисперсії і будь-яким режимом провідності: балістичним, дифузійним, або ж перехідним.

З позицій транспортної моделі Ландауера – Датта – Лундстрома у [4] побудовано узагальнену модель переносу тепла фононами. У [5] ми розглянули, як узагальнена транспортна модель ЛДЛ описує провідність графену. Надалі, в [6] ми розглянули роль розсіювання в моделі ЛДЛ й продемонстрували, що при описі транспорту електронів у провіднику в дифузійному режимі важливу роль відіграє середня довжина вільного пробігу λ , яка визначає коефіцієнт проходження T . Нарешті, в [7] було розглянуто кінетичне рівняння Больцмана (КРБ), яке в застосуванні до наноелектроніки розв'язує ті ж завдання, що й узагальнена транспортна модель ЛДЛ. Ми продемонстрували: для одних задач краще використовувати КРБ, а для других – модель ЛДЛ.

Статтю [8] було присвячено методам ви-

мірювання провідності й ефекту Холла в слабких та сильних магнітних полях, зокрема й за наявності перепаду температур на контактах провідника. В ній ми також обговорили, як уникнути при вимірюванні впливу артефактів, таких, як опір на контактах, та неконтрольованих термоелектричних ефектів, та продемонстрували, як здійснюється обробка результатів при конкретних вимірюваннях.

Глибший розгляд концепції «знизу-вгору» сучасної наноелектроніки та інших аспектів використання моделі ЛДЛ читач знайде в [9, 10]. У цій статті ми натомість проаналізуємо явище кулонівської блокади в одноелектронному транзисторі на одній молекулі в рамках концепції «знизу – вгору» і, для порівняння, в традиційній концепції «згори – вниз» з застосуванням макроскопічних властивостей і понять, як-от ємність провідного каналу тощо.

Раніше ми розглядали квантовий транспорт електронів у пружному провіднику методом нерівноважних функцій Гріна (НРФГ) в матричному зображенні [11, 12]. Провідник описувався матрицею гамільтоніану $[H]$, взаємодія між каналом провідності й контактами 1 та 2 описувалися матрицями власної енергії $[\Sigma_1]$ та $[\Sigma_2]$, а взаємодія електрона в каналі з його довкіллям описувалася матрицею власної енергії $[\Sigma_0]$, яка може розглядатися як додатковий віртуальний контакт (рис.1).

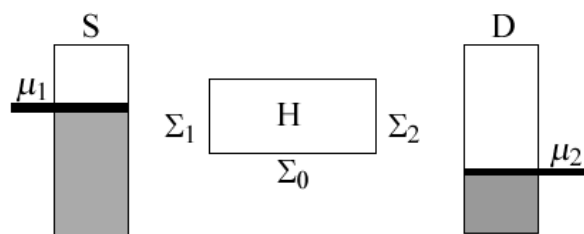


Рис. 1. Провідник взаємодіє з контактами ($[\Sigma_1]$ та $[\Sigma_2]$) і навколишнім середовищем ($[\Sigma_0]$). Прикладена до провідника напруга визначається різницею електрохімічних потенціалів

$$\mu_1 - \mu_2 = qV.$$

Якщо перелічені вхідні матриці визначені, то задача зводиться до чотирьох рівнянь (6), (13), (14) і (16) у [11], розв'язок яких визначає всю електрофізику нашого резистора. Однак взаємодію всередині каналу $[\Sigma_0]$ ми або взагалі не враховували (когерентний транспорт), або розглядали тільки процеси пружного дефазування, описувані рівняннями (1) в [12] та (176) – (178) у [13]. Такий вибір $[\Sigma_0]$ не дозволяє врахувати обміну енергією з навколишнім середовищем, і вплив на транспорт електронів це середовище чинить тільки внаслідок врахування обміну імпульсами та «фазами» [12, 13]. Фактично в цих роботах ішлося про пружні резистори з урахуванням квантовомеханічних ефектів. Загальний метод НРФГ застосовувався до пружних резисторів за аналогією до розгляду пружних провідників з використанням кінетичного рівняння Больцмана (КРБ) [7, 14 – 16].

Як можна вийти за межі моделі пружного резистора? Для квазікласичного електронного транспорту непружні взаємодії можна врахувати в рамках формалізму КРБ. Аналогічно це можна зробити для квантового транспорту в рамках методу НРФГ. Розгляд пружного дефазування в [12, 13] враховує лише окремі взаємодії, більш повний розгляд можна знайти в класичних роботах [17 – 19].

Моделювання провідників із симетричними контактами (рис. 28 в [10]) не може слугувати критерієм відмінності між доброю теоретичною моделлю та незадовільною. Ефективною перевіркою моделей непружного розсіяння може слугувати канал провідності, зображений на рис. 29 в [10], в якому весь струм на обох контактах обумовлено непружними процесами.

А взагалі, які межі застосування методу НРФГ?

Метод НРФГ було розроблено на початку 60-х років на основі квантової багаточастинкової теорії збурень (БЧТЗ) [20 – 22]. Здавалося, що БЧТЗ може, в принципі, врахувати будь-які взаємодії. Але це не зовсім так, бо це все ж таки теорія збурень, яка в певному розумінні нагадує обчислення $(1-x)^{-1}$ через розклад $1+x+x^2+x^3+\dots$, що можна робити, коли $|x| < 1$. В зворотному випадку цей розклад незастосовний, і потрібні

інші підходи, не пов'язані з теорією збурень (або ж потрібно шукати інший малий параметр теорії збурень).

До рівноважних задач замість БЧТЗ можна ефективно застосовувати, наприклад, методи теорії функціоналу густини, які широко використовують у квантовій хімії [23]. Моделювання нерівноважних задач значно складніше, бо за відсутності рівноваги виникає цілий спектр багаточастинкових станів, які складним чином взаємодіють із контактами. Однак зазвичай у тій або іншій спеціальній задачі фізику транспортного процесу вдається так або інакше успішно моделювати.

Існують, однак, експериментально спостережувані факти, як-от явище кулонівської блокади при транспорті одного електрона [24 – 26], коли традиційна хартрі–фоківська модель врахування міжелектронної взаємодії в рамках теорії самоузгодженого поля не працює. Хоча не виключено, що в майбутньому пощастить побудувати такі матриці власної енергії $[\Sigma]$ та $[\Sigma^{in}]$ в методі НРФГ, щоб розповсюдити його і на ці явища.

2. Кулонівська блокада при транспорті одного електрона

Дотримуючись базових положень концепції «знизу – вгору», за аналогією з найпростішим однорівневим резистором з однією модою провідності з енергією ε (§3.1 в [27]), розгляньмо двомодовий резистор, кожний з двох рівнів якого зайнято одним електроном – одним зі спіном «угору», другим – зі спіном «униз», що мають одну й ту саму енергію ε (рис. 2).

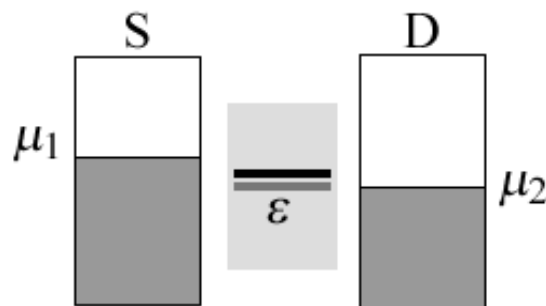


Рис. 2. Вихідна схема напівзаповнених станів у явищі кулонівської блокади.

Також припустімо, що електрохімічний потенціал μ збігається точно з енергією рівнів ε , і тому кожний з рівнів заповнено наполовину,

оскільки фермівська функція $f_0|_{\varepsilon=\mu} = 0.5$ [1]. Слід очікувати високого значення провідності, бо електрохімічний потенціал лежить посередині кожного з двох однаково розширених рівнів енергії ε [1, 27].

Однак, якщо питома (в перерахунку на один електрон) енергія заряджування провідника (переміщення ззовні додаткового електрона в цей провідник) U_0 [10] достатньо велика, то спектр енергій у провіднику зміниться: один із рівнів із цим додатковим електроном підніметься вище на величину U_0 (рис. 3).

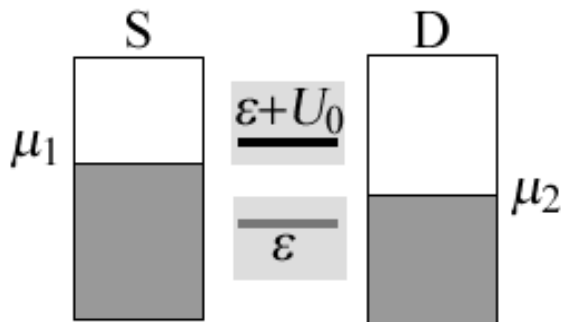


Рис. 3. Кулонівська блокада з позиції концепції «знизу – вгору»: двохмодовий канал провідності (рис. 2) з урахуванням енергії заряджування має суттєву меншу густину станів в околі енергії $E = \mu$, а, отже, й суттєво більший опір, якщо питома енергія заряджування провідника

U_0 достатньо велика.

Чому вгору не зсувається й другий рівень з електроном? Тому, що рівень енергії з електроном не може «відчувати» потенціал, створений цим таки електроном. Цей ефект самовзаємодії не враховується в обмеженому методі самоузгодженого поля Хартрі – Фока, і тому ми вважали [10], що для системи N електронів $U = U_0 N$. Натомість у позбавленому цього обмеження підході в методі самоузгодженого поля [28 – 30], коли кожний рівень i відчуває дію потенціалу U_i , який залежить від зміни числа електронів, які займають усі рівні, крім

i -го, маємо:

$$U_i = U_0(N - N_i). \quad (1)$$

Якщо використати (1) замість $U = U_0 N$, ми одержимо картину заселеності, зображену на рис. 3, з електрохімічним потенціалом μ поблизу моди провідника, заселеної одним електроном. Тому самоузгоджений розв’язок у рамках підходу без обмежень виглядатиме так:

$$N_{dn} = 1, \quad U_{up} = U_0, \quad N_{up} = 0, \quad U_{dn} = 0, \quad (2)$$

що означає: нижній рівень заселено ($N_{dn} = 1$), а результуючий потенціал ($U_{up} = U_0$) зсуває рівень для електрона зі спіном «вгору», і цей рівень буде порожнім ($N_{up} = 0$). Оскільки зсунутий угору рівень не заселений, то потенціал, який «відчуває» нижній рівень, дорівнює нулеві ($U_{dn} = 0$), і цей рівень не зазнає зсуву.

Ця картина симетрична щодо заміни «вгору» на «вниз»:

$$N_{up} = 1, \quad U_{dn} = U_0, \quad N_{dn} = 0, \quad U_{up} = 0. \quad (3)$$

Цей набір (3) також є розв’язком. Чисельно процедура самоузгодження прямуватиме до одного чи до другого розв’язку (2) чи (3) в залежності, зокрема, від того, характеризуватиметься початкове наближення в ітераційному процесі більшим значенням N_{up} чи N_{dn} .

Явище кулонівської блокади можна спостерігати, якщо питома енергія заряджування U_0 набагато перевищує теплову енергію kT і відповідне розмивання спектральних ліній провідника. При додаванні одного електрона до провідника його потенціал збільшується на U_0/q . Для масивних провідників цей потенціал складає мікрвольти чи навіть менше, і його не можна спостерігати навіть при дуже низьких температурах, – адже будь-який енергетичний параметр провідника розмивається на kT , що становить ~ 25 меВ при кімнатній температурі і ~ 200 мкеВ при температурі ~ 1 К. Отже, ефект заряджування провідника, що спричиняє явище кулонівської блокади, можна спостерігати для достатньо малих провідників (якщо енергія U_0 ,

наприклад, стає порядку 1 meV , це можна зробити за гелієвих температур). Але для провідників молекулярного розміру енергія U_0 може складати сотні меВ, що дає можливість спостерігати явище кулонівської блокади навіть при кімнатній температурі.

Є ще й другий фактор, який обмежує можливість спостереження ефекту кулонівської блокади. Окрім температурного розмивання всіх енергетичних параметрів резистора $\sim kT$ існує ще й більш фундаментальне розширення $\gamma \sim h/t$, пов'язане з часом прольоту t електрона через пристрій. Ефект заряджування провідника можемо спостерігати тільки тоді, коли кулонівська щілина U_0 суттєво перевищує це розширення $U_0 \gg h/t$. Спостереження ефекту кулонівської блокади навіть для найменших провідників передбачає наявність добрих контактів у вимірювальній схемі.

Згодом ми обговоримо умови спостереження кулонівської блокади в традиційному контексті через контактні опори й параметризацію всіх взаємодій в каналі провідності сумарною ємністю [31, 32]. А зараз перейдемо до розгляду вольт-амперних характеристик (ВАХ) згаданої двохрівневої моделі.

2.1. Вольт-амперні характеристики

Ми спростимо розгляд двохмодової моделі провідника: нехай його рівні енергії фіксовані щодо витоку S і не зазнають електростатичного впливу [10] з боку стоку D. Нехтуючи електрон-електронною взаємодією ($U = 0$), одержимо якісний хід ВАХ, зображений на рис. 4.

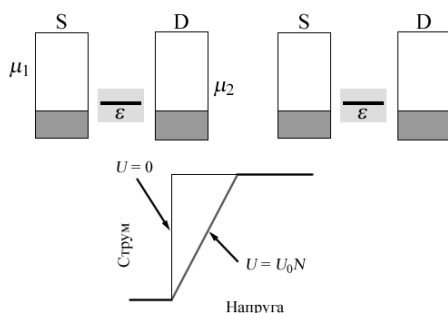


Рис. 4. Якісний хід ВАХ двохмодового резистора при $U = 0$ і $U = U_0N$.

Щойно електрохімічний потенціал μ_2 перетне енергію рівнів ϵ , як струм відразу ж досягне свого максимального значення.

Якщо на наступному етапі врахувати ефект заряджування провідника через самоузгоджений потенціал $U = U_0$, то зростання струму відбуватиметься в межах певного діапазону за шкалою напруг порядку $\sim U_0/q$, оскільки заряджування зсуває рівні вгору й потрібна більша напруга, щоб цілком покрити рівні енергії провідника.

Якщо ж урахувати ефект самовзаємодії в підході без обмежень (1), ми одержимо ВАХ з проміжним плато, походження якого ілюструє рис. 5.

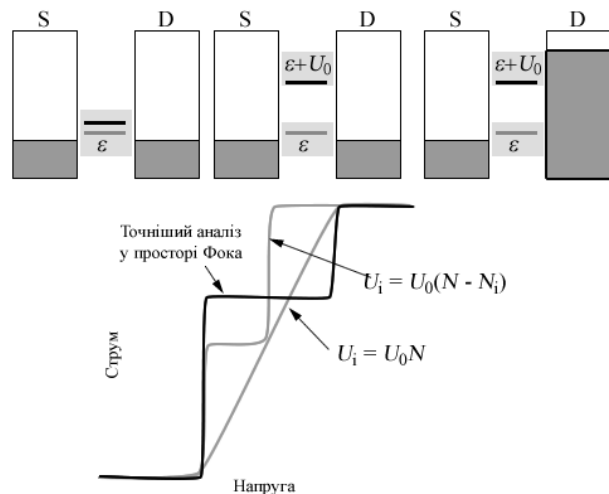


Рис. 5. Точніше розташування плато на ВАХ згідно з аналізом у просторі Фока.

Як видно з зонних діаграм на рис.5, спершу половинний внесок у повну провідність дає тільки нижній рівень (діаграма посередині), а повного струму ми досягнемо тільки тоді (діаграма праворуч), коли подано достатній потенціал μ_2 , щоб рівень хімпотенціалу праворуч опинився вище від рівня з енергією $\epsilon + U_0$.

Це проміжне плато справді неодноразово спостерігали експериментально, але кількісно його висота дорівнює не половині, а двом третинам від повного струму $2q/t$. Цю відмінність неможливо пояснити в рамках одночастинкової моделі провідника. Однак, її можна природним чином отримати при переході до простору Фока.

2.2. Моделювання заряджування провідника в фоківському просторі

Ми вже використовували опис квантового стану провідника в просторі Фока [33, 34]. Якщо в одночастинковій моделі ми говоримо про заповнення чи спустошення рівнів енергії провідника електронами через контакти, то фоківське зображення дає можливість говорити про перехід усієї системи електронів провідника з одного стану в другий.

Так, рис. 6 демонструє однорівневий резистор в одночастинковому зображенні і в просторі Фока: стан 0 – порожній, а стан 1 – заселений.

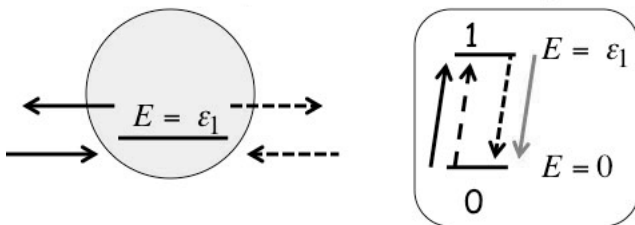


Рис. 6. Одномодовий резистор в одночастинковому зображенні (ліворуч) і в фоківському просторі (праворуч).

На рис. 7 одночастинкову модель двохрівневого резистора зіставлено з його ж фоківським зображенням, яке демонструє чотири можливі стани провідника, які відрізняються заселеністю цих станів електронами.

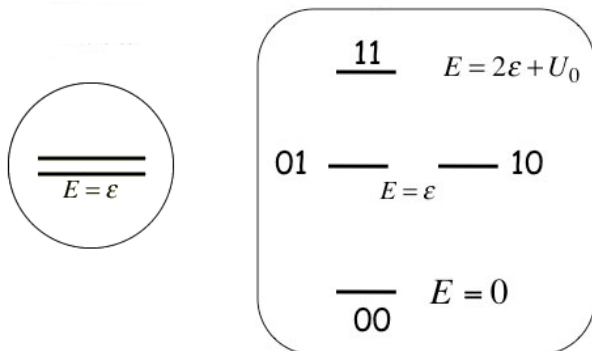


Рис. 7. Двохмодовий резистор в одночастинковому зображенні (ліворуч) і в фоківському просторі (праворуч).

В загальному випадку N -рівневий резистор має 2^N станів у просторі Фока. Ми ще повернемося до розгляду цього загального випадку.

А зараз розглянемо рівноважний стан у просторі Фока. Процедура обчислення ймовірності того, що система перебуватиме в стані i , в умовах рівноваги добре відома [33, 34]:

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-(E_i - \mu N_i)/kT}, \quad (4)$$

де Z – нормувальна стала.

Нехай ми хочемо знайти рівноважне число електронів n у двохмодовому провіднику (рис. 7) в залежності від електрохімічного потенціалу μ . Для n у фоківському просторі маємо:

$$n = \sum_i N_i p_i = p_{01} + p_{10} + 2p_{11}, \quad (5)$$

де ймовірності p_i обчислюються за (4). Нехай $\varepsilon = 10kT$ і $U_0 = 20kT$. Обчислення дають графіки, зображені на рис. 8.

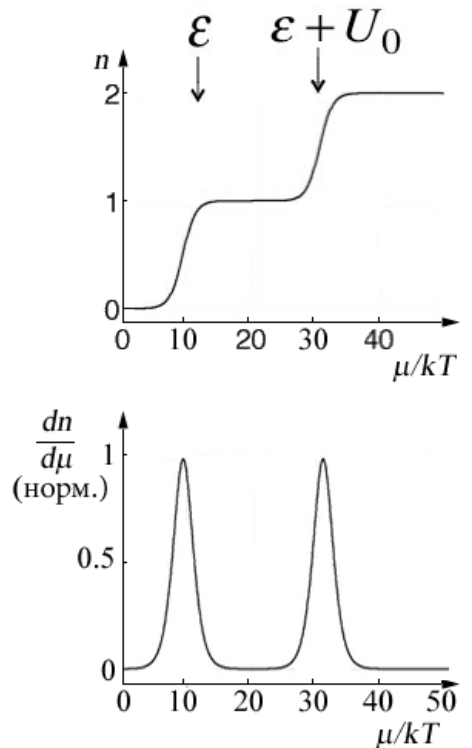


Рис. 8. Рівноважне число електронів n у двохмодовому провіднику (рис. 7) як функція μ/kT при $\varepsilon = 10kT$ та $U_0 = 20kT$ [9].

Провідність пропорційна $dn/d\mu$ і, згідно з формулою Ландауера [1], набуває пікових значень при $\mu = \varepsilon$ та $\mu = \varepsilon + U_0$. Звернімо увагу на те, що число електронів у каналі змінюється на одиницю, щойно μ набуває значення ε , і далі значення $\varepsilon + U_0$, як і слід було очікувати з рис. 3. Зазначмо, однак, що при цьому ми не розглядали, як на рис. 3, два одноелектронні стани з різними енергіями. Ми натомість розглядали два одноелектронні стани з тією ж самою енергією, але врахували енергію взаємодії в просторі Фока (рис. 7).

Саме пікові значення провідності спостерігають експериментально в низьковольтовому режимі кулонівської блокади для нанорезисторів за умови, що U_0 перевищує як теплову енергію kT , так і фундаментальне розширення ($U_0 \gg h/t$).

Низьковольтна провідність є рівноважною властивістю [9, 10], і для її опису досить рівноважної статистичної механіки. Струм за межами режиму лінійного відгуку при вищій напрузі потребує вже методів нерівноважної статистичної механіки. Далі ми покажемо, як одержати плато на рівні дві третини від повного струму (рис. 5) шляхом обчислення струму при високій напрузі в фоківському зображенні.

2.3. Обчислення струму в фоківському просторі

Для обчислення струму потрібно записати рівняння для ймовірності того, що система перебуває в одному з доступних станів, при цьому сума ймовірностей за всіма можливими станами повинна дорівнювати одиниці. Так, для струму в однорівневому резисторі в напівкласичній моделі (§3 у [13]) ми мали:

$$v_1 p_0 = v_2 p_1 \Rightarrow p_1/p_0 = v_1/v_2 \Rightarrow p_1 = v_1/(v_1 + v_2), \quad (6)$$

де лівий контакт переводить систему зі стану 0 в стан 1 зі швидкістю v_1 , а правий контакт повертає систему в початковий стан зі швидкістю v_2 , при цьому обидва процеси в стані рівноваги повинні врівноважувати один одного, і має місце співвідношення $p_0 + p_1 = 1$. В кінце-

вому підсумку струм дорівнює

$$I = qv_2 p_1 = q \frac{v_1 v_2}{v_1 + v_2}, \quad (7)$$

що відповідає результатів, отриманому раніше в одночастинковій моделі (§3 в [13]).

Такий підхід особливо ефективний при розгляді систем з декількома станами, які взаємодіють. Розгляньмо, наприклад, двоірвневий резистор, на який подано таку напругу, що електрони, які входять у провідник з лівого контакту, переводять систему зі стану 00 у стан 01 або 10, але не в 11 - через велике значення питомої енергії заряджування U_0 (рис. 9).

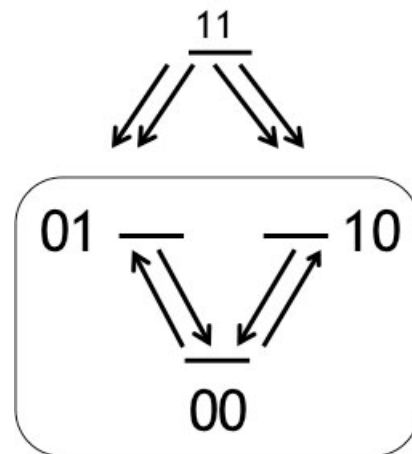


Рис. 9. Умови появи плато на рівні дві третини від повного струму (див. рис. 5).

Покажемо, що плато на рівні дві третини від значення повного струму (рис. 5) з'являється саме за умов, коли система не може перейти в стан 11, а може тільки залишити його.

З кінетики процесів за участю тільки трьох станів 00, 01 та 10 за умов динамічної рівноваги маємо:

$$2v_1 p_{00} = v_2 (p_{01} + p_{10}) \Rightarrow \frac{p_{01} + p_{10}}{p_{00}} = \frac{2v_1}{v_2}, \quad (8)$$

звідки з урахуванням нормування $p_{00} + p_{01} + p_{10} = 1$ одержуємо:

$$p_{01} + p_{10} = \frac{2v_1}{2v_1 + v_2}, \quad (9)$$

тож у кінцевому підсумку струм дорівнює

$$I = qv_2(p_{01} + p_{10}) = q \frac{2v_1v_2}{2v_1 + v_2}. \quad (10)$$

За умови однаковості прямих і зворотних потоків електронів у провіднику ($v_1 = v_2$) з (10) з очевидністю випливає, що струм дорівнюватиме саме $2/3$ від його максимального значення:

$$I = \frac{2}{3} qv_1. \quad (11)$$

Такий результат неможливо отримати в одночастинковій моделі. Наш двохмодовий резистор за умов, які ми розглядаємо, може перебувати в станах 00, 01 та 10, але не в стані 11. В одночастинковій моделі електрон може перебувати в будь-якому з цих станів з імовірністю $1/3$. Якщо електрони не взаємодіють один з одним, то ймовірність заселити стан двома електронами (зі спінами «вгору» та «вниз») становитиме $1/9$. Насправді ж така ймовірність дорівнює нулеві, що вказує на сильно корельований рух електронів (рис. 10).

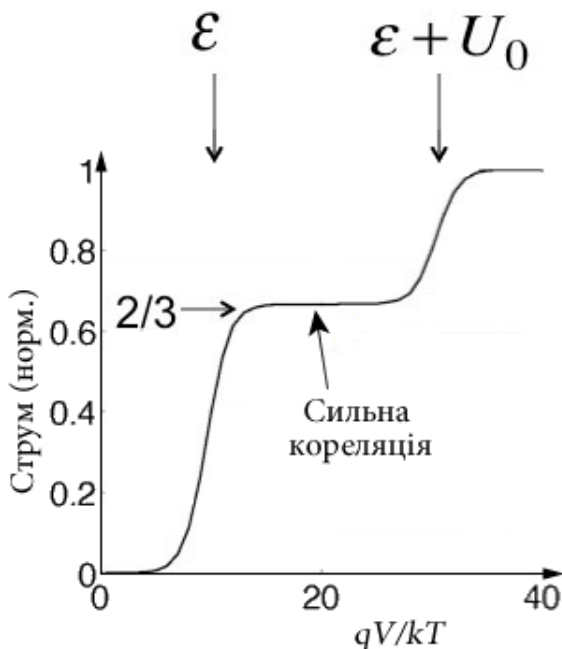


Рис. 10. Проміжне плато на ВАХ (рис. 5) відповідає сильно корельованому станів електронів.

Дотримуючись позицій концепції «знизу – вгору» [9, 10, 33], ми розглянули явище ку-

лонівської блокади в молекулярній електроніці в пристрої, базованому на русі одного-єдиного електрона. Традиційно, однак, явище кулонівської блокади розглядають з позицій концепції «згори – вниз», застосовуючи таке поняття, як ємність нанопровідника. Розгляньмо фізику кулонівської блокади у межах і цього підходу.

3. Одноелектронний транзистор на одній молекулі

Упродовж першого десятиліття XXI століття успіхи молекулярної електроніки втілюються, зокрема, в створення одноелектронного польового транзистора (Single-Electron Transistor/SET) на одній молекулі - наприклад, на молекулі бензолу - [35 – 43], схематично зображеного на рис. 11.

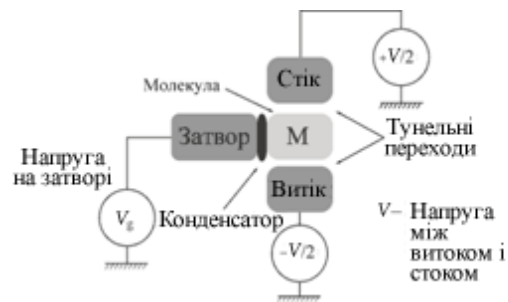


Рис. 11. Принципова схема SET. Енергія електронних станів молекули М контролюється електростатичним полем затвору.

Розглядають два механізми перенесення електронів у SET: когерентне тунелювання й послідовне тунелювання. Когерентне тунелювання реалізується в випадку сильного зв'язку молекули М з металевою поверхнею електродів, наприклад, через сульфідні містки. Час життя електронів на М короткий, електрони не встигають локалізуватися й рухаються когерентно до стокового електроду. При когерентному тунелюванні наявність електронних станів молекули М у вікні тунелювання не обов'язкова, електрони можуть здійснювати транспорт через «хвости» короткоживучих розширених станів молекули, наприклад, найнижчого незаповненого стану (Lowest Unoccupied Molecular Orbital/LUMO) (рис. 12).

Послідовне тунелювання реалізується в випадку слабого зв'язку молекули з поверхнею електродів. Хвильові властивості електрона дозволяють йому долати тунельний бар'єр, а його корпускулярна природа призводить до дискретності перенесення заряду, внаслідок чого за певних умов у тунельних наноконтактах виникає пригнічення електронного транспорту, коли за ненульової напруги між витоком і стоком струм між ними дорівнює нулеві (це явище отримало назву «кулонівської блокади» [24]).

Молекули – це нанорозмірні провідники. Зі зменшенням розмірів провідника зменшується і його електрична ємність. Сьогодні вже можна експериментально досліджувати настільки малі провідники, що для них ємність C уже така, що навіть кулонівська енергія q^2/C одного додаткового електрона на молекулі може виявитися істотною. За таких умов слід враховувати вплив кулонівських ефектів на перенесення заряду через молекулу. Через ці ефекти може реалізуватися явище кулонівської блокади, коли до електродів прикладено ненульову напругу, а струм через провідник не проходить.

Наведемо простий приклад кулонівської блокади. Розглянемо конденсатор з ємністю C й зарядами $+Q$ та $-Q$ на обкладках. Електростатична енергія такого конденсатора дорівнює $Q^2/2C = CV^2/2$, де напруга між обкладками $V = Q/C$. Поставмо питання: за якої напруги стає можливе тунелювання електрона з однієї обкладки на другу? Якщо електрон тунелює з негативно зарядженого електрода на позитивно заряджений, то заряд на обкладці стає рівним $Q - |q|$, а зміна енергії, що дорівнює

$$(Q - |q|)^2/2C - Q^2/2C = (q^2 - 2|q|Q)/2C, \quad (12)$$

повинна бути від'ємна, щоб процес перенесення електрона супроводжувався виграшем енергії й став можливим. Тому з (12) видно, що електронний транспорт стає можливий за напруг $V > |q|/2C$, і, навпаки, він неможливий за

$|V| < |q|/2C$. У цьому другому випадку маємо нульовий тунельний струм за ненульової напруги на обкладках, що і є найпростішим прикладом явища кулонівської блокади.

Тунелювавши з витоку на молекулу M , електрон живе на ній достатньо довго, встигає локалізуватися і, таким чином, «втрачає» всю інформацію про свою передісторію. Подальше тунелювання цього електрона на стік вже ніяк не пов'язане з його тунелюванням з витоку на молекулу. Це – механізм послідовного тунелювання. Експериментально показано [37], що реалізуватися він може тільки за наявності дискретного електронного стану молекули M у вікні тунелювання, наприклад, стану EA (від Electron Affinity – електронна спорідненість), що відповідає захопленню молекулою додаткового електрона і переходу її в заряджений стан M^- , енергія якого визначається спорідненістю молекули до електрона EA , або ж стану IP (від Ionization Potential – потенціал іонізації), що відповідає втраті одного електрона молекулою, що переходить у заряджений стан M^+ , енергія якого визначається потенціалом іонізації молекули IP (рис. 12).

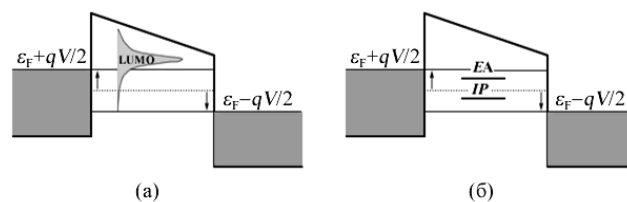


Рис. 12. Когерентне (а) і послідовне (б) тунелювання електрона в SET. LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) – стани найнижчої незаселеної молекулярної орбіталі.

Розташування рівнів енергії EA та IP одночасно заряджених станів молекули M^- та M^+ , так само як і вищих кратних заряджених станів у каналі тунелювання, регулюється потенціалом на затворі V_g , що дозволяє «зачиняти» і «відчиняти» канал тунелювання електронів.

3.1. Елементарна теорія SET

Зв'язок молекули М з усіма трьома електродами (рис. 11) ємнісний: зміна потенціалу будь-якого з електродів тягне за собою зміну електростатичної енергії молекули М. Два електроди (витік S і стік D) пов'язані з М тунельно й перенесення електрона можливе тільки між цими електродами. Тунельний зв'язок означає, що електрон, який бере участь у процесі транспорту, перебуває або на М, або на одному з цих двох електродів. Спростимо ситуацію. Припустимо, що всі взаємодії між електроном, який переноситься на молекулу М, та рештою електронів як молекули М, так і обох електродів, можна параметризувати сумарною ємністю C . Припустимо так само, що значення C не залежить від того, в якому зарядовому стані перебуває молекула М. Тоді електростатична енергія молекули М з N електронами дорівнює

$$Q^2/2C = (Nq)^2/2C. \quad (13)$$

Повна енергія молекули М з N електронами дорівнює

$$E(N) = \sum_{i=1}^N E_i + (Nq)^2/2C, \quad (14)$$

де E_i – енергія i -го електрона в самоузгодженому полі решти електронів. При появі в молекули М додаткового електрона повна енергія стає рівною

$$E(N+1) = \sum_{i=1}^{N+1} E_i + \frac{[(N+1)q]^2}{2C}, \quad (15)$$

а коли електрон залишає молекулу М –

$$E(N-1) = \sum_{i=1}^{N-1} E_i + \frac{[(N-1)q]^2}{2C}, \quad (16)$$

тож різниця $E(N) - E(N-1)$ дорівнює електрохімічному потенціалу N -го електрона

$$\mu_N \equiv E(N) - E(N-1) = E_N + (N-1/2)q^2/C, \quad (17)$$

що визначається як мінімальна енергія, необхідна для додавання в систему N -го електрона. Щодо μ_N виявиться меншою від μ_S та μ_D ,

N -й електрон перейде на М. Для додавання до молекули М з N електронами ще одного електрона електрохімічний потенціал становить

$$\mu_{N+1} = \mu_N + \frac{q^2}{C} + \Delta E_N, \quad (18)$$

де $\Delta E_N = E_{N+1} - E_N$ повинне бути менше від μ_S і μ_D , щоб таке додавання стало можливе. Для спрощення реальної ситуації припустимо, що ΔE_N слабо залежить від величини заряду на молекулі М, так що далі ми опустимо індекс N у ΔE_N . Таким чином, енергія $N+1$ -го електрона повинна бути більшою від енергії N -го електрона на величину енергії заряджування $q^2/C + \Delta E$. Перший доданок в енергії заряджування молекули М – це енергія $q^2/C \equiv E_C$, необхідна для долання кулонівського відштовхування між електронами. Другий доданок ΔE – це результат дискретності спектру молекули.

Проілюструємо отримані висновки на рис. 13 для двох ситуацій: (а) перенесення електрона неможливе (стан транзистора «off») і (б) перенесення дозволене (стан транзистора «on»). Нехай у першому випадку енергетична діаграма SET така: $\mu_{N+1} > \mu_D > \mu_S > \mu_N$, а в другому випадку $\mu_D > \mu_{N+1} > \mu_S > \mu_N$. В першому випадку каналом тунелювання є молекула М з N електронами. Найближчий рівень з енергією μ_{N+1} не заповнений електронами й лежить вище від енергії Фермі електродів витоку й стоку, в каналі тунелювання немає жодного вільного рівня, перенесення електрона «блоковане», стан транзистора – «off».

Протилежна ситуація зображена на рис. 13б.

В каналі тунелювання є стан з енергією μ_{N+1} , електрон може перейти зі стокового електроду на витік. Електричний струм можна забезпечити шляхом періодичної зміни зарядового стану молекули в каналі тунелювання з N на $N+1$. Змінити число електронів на молекулі М можна зміною потенціалу затвору V_g , оскільки саме від нього залежить енергія заряджування молекули.

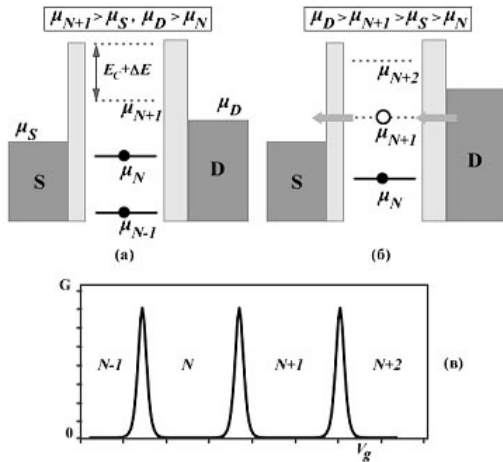


Рис. 13. Перенесення електрона в SET. Діаграми енергії зображені для двох різних ситуацій. У випадку (а) число електронів молекули М фіксоване зі значенням N , перенесення електрона на М «блоковане», стан транзистора – «off»; у випадку (б) число електронів на молекулі М осцилює між значеннями N та $N + 1$, стан – «on»; (в) кулонівські осциляції (умовн. од.).

Характерна залежність провідності G від потенціалу затвору V_g в SET у вигляді послідовності різких піків та долин, що спостерігається експериментально за невеликих значень різниці потенціалів на електродах витоку й стоку, зображена на рис. 13в. В долинах число електронів молекули М дорівнює $N - 1, N, N + 1, N + 2$ тощо, й струм блокується енергією заряджування $q^2/C + \Delta E$, що відповідає ситуації на рис. 13а. Піки провідності відповідають ситуації на рис. 13б, коли зарядовий стан молекули в каналі тунелювання осцилює між двома своїми значеннями. Наприклад, пік провідності між долинами з N та $N + 1$ електронами відповідає осциляції молекули М між її зарядовими станами з N та $N + 1$ електронами. Це – кулонівські осциляції.

Для спостереження кулонівських осциляцій енергія заряджування молекули $q^2/C + \Delta E$ повинна бути набагато більшою від теплової енергії kT . В іншому разі теплові флуктуації «перекривають» кулонівські осциляції.

Також необхідно, щоб число електронів молекули було надійно визначеною спостережуваною величиною, що не флуктує в рівноважному стані. Покажемо, що це тягне за собою вимогу високої резистивності контактів

між молекулою та електродами витоку й стоку. Для спрощення вважатимемо опори контактів між витоком і молекулою, і між молекулою і стоком симетричними і рівними R_c . Тоді час входження електрона в молекулу через контакт (або виходу з неї) можна оцінити за порядком величин за відомою формулою:

$$\Delta t \sim R_c C. \quad (19)$$

З іншого боку, входячи в молекулу (або виходячи з неї) електрон змінює її енергію на

$$\Delta \varepsilon \sim \frac{q^2}{C}. \quad (20)$$

Звернімо увагу на те, що величини, описувані (19) і (20), входять у фундаментальне співвідношення невизначеностей:

$$\Delta \varepsilon \Delta t \sim q^2 R_c \geq h. \quad (21)$$

З (21) випливає, що, для унеможливлення флуктуацій заряду в рівноважному стані, кількісно опір контакту R_c повинен набагато перевищувати квант електричного опору, який визначається сталою фон Клітцинга

$\frac{h}{q^2} \approx 25,812$ кОм [1]. Отже, для експериментального спостереження кулонівських осциляцій необхідно, щоб виконувалися дві умови одночасно:

$$q^2/C + \Delta E \gg kT, \quad (22)$$

$$R_c \gg \frac{h}{q^2}. \quad (23)$$

Теорію одноелектронного польового транзистора вже розроблено достатньо глибоко [24 – 26, 44, 45]. Явище одноелектронного переносу вивчено експериментально для різних нанорозмірних систем: металічних наночастинок [46], напівпровідникових гетероструктур [47, 48], напівпровідникових нанокристалів [49], вуглецевих нанотрубок [50, 51] і окремих молекул [35 – 43].

3.2. Умови перенесення електрона з витоку на стік

Для знаходження умов, за яких можливе перенесення електрона в одноелектронному транзисторі з витока на стік, випишемо очевидні співвідношення між енергією $E_M(N)$ молекули с числом електронів N у початковому незарядженому стані та енергіями $E_S(N')$ і $E_D(N'')$ електронів у витоці та стоці, враховуючи ту обставину, що при переході одного електрона з витоку на молекулу енергія системи повинна знизитися [42]:

$$E_S(N') + E_M(N) \geq E_S(N' - 1) + E_M(N + 1) \quad (24)$$

Аналогічна нерівність повинна виконуватися й при переході одного електрона з молекули на стік:

$$E_M(N + 1) + E_D(N'') \geq E_M(N) + E_D(N'' + 1). \quad (25)$$

Якщо роботу виходу електрона з металу позначити W , то максимальна енергія електрона в електроді стоку становитиме $-W + qV/2$, де V – різниця потенціалів, прикладена до молекули M . Якщо припустити, що з витоку на молекулу тунелює електрон з максимальною енергією, то з очевидністю, маємо

$$E_S(N') - E_S(N' - 1) = -W + qV/2. \quad (26)$$

Тоді умова тунелювання одного електрона з витоку на молекулу набуде подальшого вигляду:

$$-W + qV/2 + E_M(N) \geq E_M(N + 1). \quad (27)$$

Оскільки мінімальна енергія електрона в електроді стоку це $-W - qV/2$, то при переході електрона з молекули на стік одержуємо:

$$E_M(N + 1) \geq -W - qV/2 + E_M(N). \quad (28)$$

Запровадимо енергію заряджування молекули

$$\Delta E_M(N) = E_M(N + 1) - E_M(N). \quad (29)$$

Тоді з двох останніх нерівностей отримаємо умови перенесення електрона з витоку на стік як:

$$q|V|/2 \geq \Delta E_M(N) + W \geq -q|V|/2. \quad (30)$$

У цьому виразі не враховано тільки вплив потенціалу затвору V_g на спектр молекули, використовуюваної як канал для електронного транспорту. Нехай у першому наближенні має місце лінійна залежність енергії заряджування від потенціалу затвору:

$$\Delta E_M(N, V_g) = \Delta E_M(N) + \alpha q V_g, \quad (31)$$

де константа зв'язку α є параметром теорії. Остаточно умови перенесення електрона з витоку на стік запишуться як:

$$q|V|/2 \geq \Delta E_M(N, V_g) + W \geq -q|V|/2. \quad (32)$$

Самоузгоджені розрахунки з урахуванням поляризації молекули електростатичним полем затвору показали [31, 32], що значення константи зв'язку затвору в випадку молекули бензолу близька до 1, а залежність енергії заряджування молекули від потенціалу затвору справді близька до лінійної (31). З використанням цих співвідношень, один з авторів (ЮОК) розрахував діаграми зарядової стабільності одноелектронного польового транзистора на молекулі бензолу, які показують залежність числа заряджених станів молекули в каналі тунелювання від напруги, що подається на електроди витоку і стоку, і від потенціалу затвору, виходячи з першопринципів [52, 53]. Енергію заряджування молекули було обчислено в наближенні теорії функціоналу густини, а взаємодію молекули з її довкіллям у реалістичній моделі нанотранзистора було враховано самоузгоджено. Було знайдено умови функціонування такого одномолекулярного польового нанотранзистора на молекулі бензолу.

4. Висновки

Ми проаналізували явище кулонівської блокади в одноелектронному транзисторі на одній

молекулі з позицій двох, здавалося б, принципово різних підходів: в концепції «знизу – вгору» наноелектроніки, в якій важливу роль відіграє підхід у теорії самоузгодженого поля без обмеження за спіном у фоківському просторі, і, для порівняння, в традиційній концепції «згори – вниз» з застосуванням макроскопічних властивостей і понять, як-от ємність провідного каналу тощо.

При цьому ми брали до уваги два механізми перенесення електронів у SET: когерентне тунелювання й послідовне тунелювання. Когерентне тунелювання реалізується в випадку сильного зв'язку молекули М з металевією поверхнею електродів, наприклад, через сульфідні містки. Час життя електронів на М короткий, електрони не встигають локалізуватися й рухаються когерентно до стокового електроду. При когерентному тунелюванні наявність електронних станів молекули М у вікні тунелювання не обов'язкова, електрони можуть здійснювати транспорт через «хвости» короткоживучих розширених станів молекули.

Послідовне тунелювання реалізується в випадку слабого зв'язку молекули з поверхнею електродів. Хвильові властивості електрона дозволяють йому долати тунельний бар'єр, а його корпускулярна природа призводить до дискретності перенесення заряду, внаслідок чого за певних умов у тунельних наноконтактах виникає пригнічення електронного транспорту, коли за ненульової напруги між витоком і стоком струм між ними дорівнює нулеві (це явище отримало назву «кулонівської блокади»).

В рамках побудованої елементарної теорії одноелектронного транзистора ми отримали чисельні оцінки для меж напруг, у яких можливе перенесення струму з витоку на стік, а також умов і параметрів, за яких можливе експериментальне спостереження явища кулонівської блокади.

На завершення наголосимо: стаття в першій частині є наслідком прослуховування одним з нас (ЮОК) курсів лекцій «Fundamentals of Nanoelectronics, Part II: Quantum Models», прочитаних он-лайн в 2012 і 2015 роках проф. Супрійо Датта (Supriyo Datta) в рамках ініціативи

Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u]. В ній також використано напрацювання авторського курсу «Фізика конденсованого середовища», який інший автор (МВС) упродовж останніх років читає для магістрів факультету радіофізики, електроніки і комп'ютерних систем Київського національного університету імені Т. Г. Шевченка.

Авторі щиро вдячні Н. Ю. Кругляк за допомогу в роботі над статтею і в підготовці її до друку.

Список використаної літератури

- [1]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. Uzahalnena model elektronnoho transportu v mikro- i nanoelektronitsi // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2015. – t. 12, No. 3. S. 4 – 27 (in Ukrainian).
- [2]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. Termoelektrychni yavysycha ta prystroi z pozytsii uzahalненоi modeli transportu elektroniv // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2015. – t. 12, No. 4. S. 5 – 18 (in Ukrainian).
- [3]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. Termoelektrychni koefitsiienty v uzahalnenii modeli transportu elektroniv // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2016. – t. 13, No. 1. S. 5 – 23 (in Ukrainian).
- [4]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. *Transport tepla fononamy v uzahalnenii modeli Landauera-Datta-Lundstroma* // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2016. – t. 13, No. 2. S. 16 – 35 (in Ukrainian).
- [5]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. *Transportni yavysycha v hrafeni v uzahalnenii modeli Landauera-Datta-Lundstroma* // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2016. – t. 13, No. 3. S. 5 – 29 (in Ukrainian).
- [6]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. *Urakhuvannia rozsiannia v uzahalnenii modeli Landauera-Datta-Lundstroma* // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2016. – t. 13, No. 4. – S. 5-18. (in Ukrainian).
- [7]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. Kinetychne rivniannia Boltsmana v uzahalnenii modeli transportu elektroniv u mikro- ta nanoelektronitsi // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2017. – t. 14, No. 1, – S. 5 – 20. (in Ukrainian).

- [8]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha. Vymiriuvannia providnostei y analiz elektrofizychnykh kharakterystyk tranzystoriv u ramkakh uzahalnoi modeli transportu elektroniv // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2017. – t. 14, No. 2, – S. 27 – 45. (in Ukrainian).
- [9]. Datta Supriyo. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport*. Hackensack, New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2012; www.nanohub.org/courses/FoN1.
- [10]. Yu. A. Kruglyak. *Nanoehlektronika «snizu - vverh»*, Odessa: TES, 2015. (in Russian).
- [11]. Kruglyak Yu. O., Strikha M. V. Uroky nanoelektroniky: Metod nerivnovazhnykh funktsii Hrina u matrychnomu zobrazhenni. 1. Teoriia // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2013. – V. 10, N 3. – P. 22 – 35 (in Ukrainian).
- [12]. Kruglyak Yu. O., Strikha M. V., Urokynanoelektroniky: Kvantova interferentsiia i defazuvannia v metodi nerivnovazhnykh funktsii Hrina // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2014. – V. 11, N 3. – P. 5 – 18. (in Ukrainian).
- [13]. Kruglyak Yu. A., Nanoelektronika «snizu – vverkh»: Metod neravnovesnykh funktsiy Grina, modelnye transportnye zadachi i kvantovaya interferentsiya // *ScienceRise.* – 2015. – t. 9, N 2(14). – s. 41 – 72. (in Russian).
- [14]. Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha, *Uroky nanoelektroniky: efekt Kholla i vymiriuvannia elektrokhimichnykh potentsialiv u kontseptsii «znyzu-vhoru»*. *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2014. – t. 11, No 1: s. 5 – 27 (in Ukrainian).
- [15]. Kruglyak Yu. O., Strikha M. V., Uroky nanoelektroniky: Rol elektrostatyky y kontaktiv u kontseptsii «znyzu – vhoru» // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2014. – V. 11, N 4. – P. 27 – 42 (in Ukrainian).
- [16]. Kruglyak Yu. A., Model provodimosti Landauera – Dattya – Lundstroma i transportnoe uravnenie Boltsmana // *ScienceRise.* – 2015. – t. 3, N 2(8). – s. 108 – 116 (in Russian).
- [17]. Danielewicz P., Quantum Theory of Non-Equilibrium Processes, *Ann. Phys.*, **152**, 239 (1984).
- [18]. Mahan G. D., Quantum Transport Equation for Electric and Magnetic Fields, *Phys. Rep.*, **145**, 251 (1987).
- [19]. Datta Supriyo. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. – Cambridge: Cambridge University Press. – 2005.
- [20]. Martin P. C., Schwinger J. Theory of many-particle systems. I // *Phys. Rev.* – 1959. – V. 115, N 6. – P. 1342 – 1373.
- [21]. Kadanoff L. P., Baym G. *Quantum Statistical Mechanics*. – New York: W. A. Benjamin. – 1962.
- [22]. Keldysh L. V. Diagrammnaya tekhnika dlya neravnovesnykh protsessov // *ZhETF.* – 1964. – T. – 47. – S. 1515 – 1527; Keldysh L. V. Diagram Technique for Non-Equilibrium Processes // *Sov. Phys. JETP.* – 1965. – V. 20. – P. 1018.
- [23]. Kryachko E. S., Ludena E. V., Density functional theory: Foundations reviewed, *Physics Rep.*, **544**, 123 – 239 (2014).
- [24]. Averin D. V., Likharev K. K. Single electrons: A correlated transfer of single electrons and Cooper pairs in systems of small tunnel junctions // In Altshuler B. L., Lee P. A., Webb R. A. (Eds.). *Mesoscopic Phenomena in Solids*. - New York: Elsevier. - 1991.
- [25]. Beenakker C. W. J. Theory of Coulomb-Blockade Oscillations in the Conductance of a Quantum Dot // *Phys. Rev. B.* - 1991. - V. 44. - N 4. - P. 1646 – 1656.
- [26]. Grabert H., Devoret M. H. (Eds.). *Single Charge Tunneling. Coulomb Blockade Phenomena In Nanostructures*. - New York: Plenum Press. - 1992. - 347 p.
- [27]. Yu. A. Kruglyak, N. Yu. Kruglyak, M. V. Strikha. Uroky nanoelektroniky: vynyknennia strumu, formuluvannia zakonu Oma i mody providnosti v kontseptsii «znyzu – vhoru» // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2012. – V. 9, N 4. – P. 5 – 30 (in Ukrainian).
- [28]. Kruglyak Yu. A., Obobshchennyi metod Khartri – Foka i ego versii: ot atomov i molekul do polimerov // *ScienceRise.* – 2014. – t. 5, N 5(3). – s. 6 – 21. (in Russian).
- [29]. Kruglyak Yu. A., Quantum-chemical studies of quasi-one-dimensional electron systems. 1. Polyenes // *ScienceRise.* – 2015. – t. 5, N 2(10). – C. 69 – 105.

- [30]. Kruglyak Yu. A., Quantum-mechanical studies of quasi-one-dimensional electron systems, Chapter 2 in Kruglyak Yu. A., Glushkov A. V. et al, *Calculational Methods in Quantum Geometry and Chaos Theory, Part 4*, Odessa, TES Publishing House, 2015, pp. 28 – 180.
- [31]. Kruglyak Yu. A. *Kvantovaya khimiya*. Kiev: 1963 – 1991. Odessa: TES, 2016. (in Russian).
- [32]. Kruglyak Yu. A., Kruglyak N. Yu., Odnoelektronnyy odnomolekulyarnyykh polevoy tranzistor: kvantovomekhanicheskoe i elektrodinamicheskoe rassmotrenie na primere molekuly benzola // *Vestnik Odesskogo gos. ekologicheskogo un-ta*, Vyp. 12, str. 201 – 214 (2011). (in Russian).
- [33]. Kruglyak Yu. O., Strikha M. V., Uroky nanoelektroniky: Elektrychnyi strum i druihi zakon termodinamiky u kontseptsii «znyzu – vhoru» // *Sens. elektron. mikrosist. tehnol.* – 2015. – V. 12, N 2. – P. 5 – 26. (in Ukrainian).
- [34]. Kruglyak Yu. A., Nanoelektronika «snizu – vverkh»: Termodinamika provodnika s tokom, informatsionno-upravlyaemyy akumulyator i kvantovaya entropiya // *ScienceRise*. – 2015. – t. 11, N 2(16). – S. 55 – 71. (in Russian).
- [35]. Park J., Pasupathy A. N., Goldsmith J. I., Chang C., Yaish Y., Petta J. R., Rinkoski M., Sethna J. P., Abruna H. D., McEuen P. L., Ralph D. C. Coulomb blockade and the Kondo effect in single-atom transistors // *Nature*. - 2002. - V. 417. - P. 722 – 725.
- [36]. Liang W., Shores M. P., Bockrath M., Long J. R., Park H. Kondo resonance in a single-molecule transistor // *Nature*. - 2002. - V. 417. - N 13. - P. 725 – 729.
- [37]. Kubatkin S., Danilov A., Hjort M., Cornil J., Bredas J. -L., Stuhr-Hansen N., Hedegard P., Bjornholm T. Single Electron Transport Through a Single Conjugated Molecule Visiting Several Redox States // *Nature*. - 2003. - V. 425. - P. 698 – 701.
- [38]. Osorio E. A., O'Neill K., Stuhr-Hansen N., Nielsen O. F., Bjornholm T., van der Zant H. S. Addition energies and vibrational fine structure measured in electromigrated single-molecule junctions based on an oligophenylenevinylene derivative // *Adv. Mater.* - 2007. - V. 19. - P. 281 – 285.
- [39]. Danilov A., Kubatkin S., Kafanov S., Hedegard P., Stuhr-Hansen N., Moth-Poulsen K., Bjornholm T. Electronic Transport in Single Molecule Junctions: Control of the Molecule-Electrode Coupling through Intramolecular Tunneling Barriers // *Nano Lett.* - 2008. - V. 8. - N 1. - P. 1 – 5.
- [40]. Thijssen J. M., van der Zant H. S. Charge transport and single-electron effects in nanoscale systems // *Phys. Status Solidi B*. - 2008. - V. 245. - N 8. - P. 1455 – 1470.
- [41]. Kaasbjerg K., Flensberg K. Strong Polarization-Induced Reduction of Addition Energies in Single-Molecule Nanojunctions // *Nano Lett.* - 2008. - V. 8. - N 11. - P. 3809 – 3814.
- [42]. Stokbro K. First-Principles Modeling of Molecular Single-Electron Transistors // *J. Phys. Chem. C*. - 2010. - V. 114. - N 48. - P. 20461 – 20465.
- [43]. Liang W. J., Shores M. P., Bockrath M., Long J. R., Park H. Kondo resonance in a single-molecule transistor // *Nature*. - 2002. - V. 417. - N 6890. - P. 725 – 729.
- [44]. Kouwenhoven L. P., Marcus C. M., McEuen P. L., Tarucha S., Westervelt R. M., Wingreen N. S. Electron transport in quantum dots // *Mesoscopic Electron Transport*, L. L. Sohn, L. P. Kouwenhoven, G. Schön (Eds.). - N. Y. : Kluwer. - 1997.
- [45]. Meirav U., Foxman E. B. Single-electron phenomena in semiconductors // *Semiconductor Science and Technology*. - 1996. - V. 11. - N 3. - P. 255 – 284.
- [46]. Fulton T. A., Dolan G. J. Observation of Single-Electron Charging Effects in Small Tunnel-Junctions // *Phys. Rev. Lett.* - 1987. - V. 59. - N 1. - P. 109 – 112.
- [47]. Scott-Thomas J. H. F., Field S. B., Kastner M. A., Smith H. I., Antoniadis D. A. Conductance Oscillations Periodic in the Density of a One-Dimensional Electron Gas // *Phys. Rev. Lett.* - 1989. - V. 62. - N 5. - P. 583 – 586.
- [48]. Reed M. A., Randall J. N., Aggarwal R. J., Matyi R. J., Moore, T. M.

- Observation of Discrete Electronic States in a Zero-Dimensional Semiconductor Nanostructure // *Phys. Rev. Lett.* - 1988. - V. 60. - N 6. - P. 535 – 537.
- [49]. Klein D. L., Roth R., Lim A. K. L., Alivisatos A. P., McEuen P. L. A single-electron transistor made from a cadmium selenide nanocrystal // *Nature*. - 1997. - V. 389. - N 6652. - P. 699 – 701.
- [50]. Tans S. J., Devoret M. H., Dai H., Thess A., Smalley R. E., Geerligs L. G., Dekker C. Individual single-wall carbon nanotubes as quantum wires // *Nature*. - 1997. - V. 386. - N 6624. - P. 474 – 477.
- [51]. Bockrath M., Cobden D. H., McEuen P. L., Chopra N. G., Zettl A., Thess A., Smalley R. E. Single-electron transport in ropes of carbon nanotubes // *Science*. - 1997. - V. 275. - N 5308. - P. 1922 – 1925.
- [52]. Kruglyak Yu., Configuration interaction in the second quantization representation: basics with applications up to full CI // *ScienceRise*. – 2014. – т. 4, N 2(4). – С. 98 – 115.
- [53]. Kruglyak Yu. A., Configuration interaction in the second quantization representation: basics with applications up to full CI, Chapter 2 in Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Kruglyak Yu. A. et al, *Computational Methods in Quantum Geometry and Chaos Theory, Part 3*, Odessa, TES Publishing House, 2015, pp. 43 – 84.
- Стаття надійшла до редакції 29.07.2017 р.

УДК 538.935+539.186 ; PACS numbers: 31.15.E-, 71.15.Mb, 85.30.Tv, 85.65.+h
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111403>

COULOMB BLOCAD AND SINGLE-ELECTRON TRANSISTOR WITHIN “BOTTOM – UP” APPROACH IN MODERN NANOELECTRONICS AND WITHIN TRADITIONAL “UP – BOTTOM” CONCEPT

Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha

Odesa State Environmental University,
Faculty of Computer Sciences
15 Lvivska Str, Odesa, Ukraine
* Taras Shevchenko Kyiv National University
Faculty of Radiophysics, Electronics and Computer Sciences,
4g Hlushkov Av, Kyiv, Ukraine
V. E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine,
41 Nauky Av, Kyiv, Ukraine

Summary

In a tutorial review article directed to serve researchers, university teachers and students, Coulomb blockade in one-molecule single-electron transistor SET is discussed under the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics, and, for comparison, within the traditional “up-bottom” concept, using macroscopic characteristics, such as the capacitance of conducting channel etc.

We took into consideration two mechanisms of electron transport in SET: coherent tunneling and serial tunneling. Coherent tunneling occurs in the case of strong binding between molecule M and metallic electrode surface. The lifetime of electron at M is short, electrons have no time to localize

there and they move in coherent way towards the drain electrode. Under coherent tunneling there is no necessity for electronic states of M molecule in tunneling window; electrons can provide transport through the “tails” of the molecule short-living broadened states.

Serial tunneling occurs in the case of weak binding between molecule M and metallic electrode surface. Electron’s wave properties enables this electron to overpass the potential barrier, while its corpuscular properties determine the discrete character of charge transport; therefore under certain conditions at tunneling nanocontacts the suppression of electron transport occurs, with zero current through SET under non-zero voltage between source and drain (this effect is known as Coulomb blockade).

In a developed elementary theory of SET we obtained numeric estimations for limits of voltages for possible electronic transport from source to drain electrodes, as well as for conditions and parameters, under which experimental observation of Coulomb blockade effect is possible.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, Coulomb blockade, single-electron transistor

UDC 538.935+539.186 ; PACS numbers: 31.15.E-, 71.15.Mb, 85.30.Tv, 85.65.+h
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111403>

КУЛОНІВСЬКА БЛОКАДА ТА ОДНОЕЛЕКТРОННИЙ ТРАНЗИСТОР У РАМКАХ КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ» СУЧАСНОЇ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ ТА В ТРАДИЦІЙНІЙ КОНЦЕПЦІЇ «ЗГОРИ – ВНИЗ»

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

Одеський державний екологічний університет,

факультет комп’ютерних наук,

вул. Львівська, 15, Одеса, Україна

тел. (067) 725 2209, *E-mail: quantumnet@yandex.ua*

* Київський національний університет ім. Т. Шевченка,

факультет радіофізики, електроніки і комп’ютерних систем,

пр. Глушкова, 4г, Київ, Україна, тел. (044) 526 0532;

Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України,

пр. Науки, 41, Київ, Україна, тел. (044) 525 6033,

E-mail: maksym_strikha@hotmail.com

Реферат

У методичній оглядовій статті, розрахованій на науковців, викладачів та студентів вищої школи, проаналізоване явище кулонівської блокади в одноелектронному транзисторі на одній молекулі з позицій двох різних підходів: в концепції «знизу – вгору» наноелектроніки і, для порівняння, в традиційній концепції «згори – вниз» з застосуванням макроскопічних властивостей і понять, як-от ємність провідного каналу тощо.

Ми брали до уваги два механізми перенесення електронів у SET: когерентне тунелювання й послідовне тунелювання. Когерентне тунелювання реалізується в випадку сильного зв’язку молекули М з металевою поверхнею електродів. Час життя електронів на М короткий, електрони не встигають локалізуватися й рухаються когерентно до стокового електроду. При когерентному

тунелюванні наявність електронних станів молекули M у вікні тунелювання не обов'язкова, електрони можуть здійснювати транспорт через «хвости» короткоживучих розширених станів молекули.

Послідовне тунелювання реалізується в випадку слабкого зв'язку молекули з поверхнею електродів. Хвильові властивості електрона дозволяють йому долати тунельний бар'єр, а його корпускулярна природа призводить до дискретності перенесення заряду, внаслідок чого за певних умов у тунельних наноконтактах виникає пригнічення електронного транспорту, коли за ненульової напруги між витоком і стоком струм між ними дорівнює нулеві (це явище отримало назву «кулонівської блокади»).

В рамках побудованої елементарної теорії одноелектронного транзистора ми отримали чисельні оцінки для меж напруг, у яких можливе перенесення струму з витоків на стік, а також умов і параметрів, за яких можливе експериментальне спостереження явища кулонівської блокади.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, кулонівська блокада, одноелектронний транзистор

ПРОЕКТУВАННЯ І МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СЕНСОРИВ

SENSORS DESIGN AND MATHEMATICAL MODELING

PACS 32.80Dz; UDC 539.192

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111406>

NEW APPROACH AND MICROSYSTEM TECHNOLOGY OF ADVANCED NON-LINEAR ANALYSIS AND MODELLING CHAOTIC ENVIRONMENTAL RADIOACTIVITY DYNAMICS

*A. V. Glushkov, Yu. Ya. Bunyakova, V. V. Buyadzhi, Yu. V. Dubrovskaya, A. A. Kuznetsova,
O. Yu. Khetselius*

Odessa State Environmental University, L'vovskaya, 15, Odessa, 65016, Ukraine
E-mail: glushkovav@gmail.com

NEW APPROACH AND MICROSYSTEM TECHNOLOGY OF ADVANCED NON-LINEAR ANALYSIS AND MODELLING CHAOTIC ENVIRONMENTAL RADIOACTIVITY DYNAMICS

*A. V. Glushkov, O. Yu. Khetselius, Yu. Ya. Bunyakova, V. V. Buyadzhi, Yu. V. Dubrovskaya,
A. A. Kuznetsova*

Abstract. We firstly present an advanced mathematical formalism and new microsystem technology to analysis, modeling and prediction of the environmental radioactivity dynamics at whole, and chaotic time series of the radionuclide dynamics in particular. It included a qualitative analysis of dynamical problem of the typical environmental radioactivity dynamics, reconstruction of the phase space with using methods of correlation dimension algorithm and false nearest neighbor points, determination of the dynamic invariants of a chaotic system, including the global Lyapunov exponents, the Kaplan-York dimension d_L , Kolmogorov entropy etc. The forecasting block contains new (in a theory of environ-

mental radioactivity dynamics and environmental protection) methods and algorithms of nonlinear prediction such as methods of predicted trajectories and neural networks modelling. As an illustration, the first data of analysis of the time series for the radon pore activity are presented and indicated on availability of the low- (and indeed middle) dimensional chaos.

Keywords: radionuclides concentration dynamics, new mathematical models, new microsystem technologies, time series analysis and prediction modelling

НОВИЙ ПІДХІД І МІКРОСИСТЕМНА ТЕХНОЛОГІЯ ВДОСКОНАЛЕНОГО НЕЛІНІЙНОГО АНАЛІЗУ І МОДЕЛЮВАННЯ ХАОТИЧНОЇ ДИНАМІКИ КОНЦЕНТРАЦІЙ РАДІОНУКЛІДІВ У НАВКОЛИШНЬОМУ СЕРЕДОВИЩУ

*О. В. Глушков, Ю. Я. Бунякова, В. В. Буюджи, Ю. В. Дубровська, Г. О. Кузнецова,
О. Ю. Хецеліус*

Анотація. Вперше ми представляємо удосконалений математичний формалізм та нову мікросистемну технологію для аналізу, моделювання та прогнозування динаміки радіоактивності навколишнього середовища в цілому та хаотичних часових рядів, зокрема динаміки радіонуклідів. Наведені якісний та кількісний підхід до проблеми аналізу часової динаміки радіоактивності у навколишньому середовищі, реконструкції фазового простору з використанням методів алгоритму кореляційної розмірності, помилкових сусідніх точок, ефективний підхід до визначення динамічних інваріантів хаотичної системи, в тому числі глобальних показників Ляпунова, розмірності Каплана-Йорка, ентропії Колмогорова тощо. Прогнозний блок містить нові (в теорії динаміки радіоактивності навколишнього середовища та охорону навколишнього середовища) методи та алгоритми нелінійного прогнозування, у т.ч. методи прогнозування траєкторій та моделювання нейронних мереж. Як ілюстрація, представлені перші дані аналізу часових рядів для порової активності радону і вказано на наявність елементів детерміністичного хаосу.

Ключові слова: динаміка концентрацій радіонуклідів, нові математичні моделі, нові мікросистемні технології, аналіз та прогнозування часових рядів

НОВЫЙ ПОДХОД И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ УСОВЕРШЕНСТВОВАННОГО НЕЛИНЕЙНОГО АНАЛИЗА И МОДЕЛИРОВАНИЯ ХАОТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ КОНЦЕНТРАЦИЙ РАДИОНУКЛИДОВ В ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ

*А. В. Глушков, Ю. Я. Бунякова, В. В. Буюджи, Ю. В. Дубровская, А. А. Кузнецова,
О. Ю. Хецелиус*

Аннотация. Мы впервые представляем усовершенствованный математический формализм и новую микросистемную технологию для анализа, моделирования и прогнозирования динамики радиоактивности окружающей среды в целом и хаотических временных рядов, в частности, динамики радионуклидов. Приведены новый качественный и количественный подход к проблеме анализа временной динамики радиоактивности в окружающей среде, реконструкции фазового пространства с использованием методов алгоритма корреляционной размерности, ложных со-

седних точек, эффективный подход к определению динамических инвариантов хаотической системы, в том числе глобальных показателей Ляпунова, размерности Каплана-Йорка, энтропии Колмогорова и др. Прогнозный блок содержит новые (в теории динамики радиоактивности окружающей среды и охраны окружающей среды) методы и алгоритмы нелинейного прогнозирования, в т.ч. методы прогнозирования траекторий и моделирование нейронных сетей. В качестве иллюстрации, представлены первые данные анализа временных рядов для поровой активности радона и указано на наличие элементов детерминистического хаоса.

Ключевые слова: динамика концентраций радионуклидов, новые математические модели, новые микросистемные технологии, анализ и прогнозирование временных рядов

1. Introduction

The correct quantitative description of environmental radioactivity dynamics is one of the most actual and important problem of the applied radioecology and radioactive environment protection with (look for example, [1-5]). The key problems of the atmospheric, hydrological and soil radionuclide dynamics includes the research radionuclide transport in the atmospheric, hydrological, soil etc environment respectively, the terrestrial radionuclide dynamics - research radionuclide transfer and migration in the terrestrial environment, marine radionuclide dynamics - research radionuclide transfer in the marine environment and radiological hydrology - research radionuclide transfer from land to fresh water environments due to hydrological phenomena. The main purposes of modeling, measurements and forecasting approach include to evaluate and predict environmental radionuclide transfer and radiation through using computer simulations and other methods, to develop improved technologies to monitor and measure radiation, to develop mechatronics systems and remote control technologies that will enable sampling and other operations in areas where humans cannot approach, to make analysis and archiving of research outputs and research samples produced by IER and other institutes around the world. Problem of studying the dynamics of chaotic dynamical systems arises in many areas of science and technology [16-20]. We are talking about a class of problems of identifying and estimating the parameters of interaction between the sources of complex (chaotic) oscillations of the time series of experimentally observed values. Problem of an analysis and forecasting the impact of anthropogenic pressure on

the state of atmosphere in an industrial city and development of the consistent, adequate schemes for modeling the properties of the concentration fields of air pollutions has been in details considered, for example, in Ref.[15].

Let us remind [1-6] that most of the models currently used to assess a state (as well as, the forecast) of an environment pollution are presently by the deterministic models or simplified ones, based on a simple statistical regressions.

The success of these models, however, is limited by their inability to describe the nonlinear characteristics of the pollutant concentration behaviour and lack of understanding of the involved physical and chemical processes. Certainly, these models can't principally used in treating the chaotic nature systems (see [7-21]). Although the use of methods of a chaos theory establishes certain fundamental limitation on the long-term predictions, however, as has been shown in a series of the papers (see, for example, [7-22]), these methods can be successfully applied to a short- or medium-term forecasting. In Ref.[5,15,16] there are presented the successful examples of the quantitatively correct description of the temporary changes in the concentration of nitrogen dioxide (NO₂) and sulfur dioxide (SO₂) in several industrial cities (Odessa, Triste, Aleppo and cities of the Gdansk region) with discovery of the low-dimensional chaos.

The main purpose of this paper is formally to present an advanced mathematical formalism and new microsystem technology to analysis, modeling and prediction of the environmental radioactivity dynamics at whole, and chaotic time series of the radionuclide dynamics in particular. It included a qualitative analysis of dynamical problem of the typical environmental radioacti-

vity dynamics, reconstruction of the phase space with using methods of correlation dimension algorithm and false nearest neighbor points, determination of the dynamic invariants of a chaotic system, including the global Lyapunov exponents, the Kaplan-York dimension d_L , Kolmogorov entropy etc. The forecasting block contains new (in a theory of environmental radioactivity dynamics and environmental protection) methods and algorithms of nonlinear prediction such as methods of predicted trajectories and neural networks modelling. As an illustration, the first data of analysis of the time series for the radon pore activity are presented and indicated on availability of the low- (and indeed middle) dimensional chaos. All calculations are performed with using “Geomath”, “Superatom” and “Quantum Chaos” computational codes [15-84].

2. Advanced technique to analysis radionuclide dynamics in environment systems

As usually, we start from the first key task on testing a chaos in the time series of environmental radioactivity dynamics. Firstly, as usually, one should consider scalar measurements of the system dynamical parameter, say, radionuclide concentration:

$$(n)=s(t_0+ n\Delta t)=s(n). \tag{1}$$

Here t_0 is a start time, Δt is the time step, and n is number of the measurements. The first step of the whole methodology begins with the use of a known test for the presence of chaos in the system noise, which was proposed Gottwald and Melbourne [7]. Its main idea boils down to the choice of some constant c , rather, several values of c , which further define the value (with accounting for Eq.(1)): :

$$p(n) = \sum_{j=1}^n F(j) \cos(jc), \tag{2}$$

and then mean-squared shift:

$$M(n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N [p(j+n) - p(j)]^2, \tag{3}$$

and at last a asymptotic growth rate $M(n)$:

$$K = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log M(n)}{\log n}. \tag{4}$$

According to Ref. [7], in the case of regular dynamics $M(n)$ is a limited function of n with a unit probability; respectively, in the case of chaotic dynamics $M(n)=V(n)+O(1)$ for some $V>0$. If the parameter $K = 0$, a dynamics of the studied system is considered as a regular, in the case of $K = 1$ one should talk about chaotic dynamics. The fundamental idea of our approach to studying the dynamical radionuclide characteristics in atmospheric and others environment is ideologically reduced to chaos-cybernetic analysis, playback (and reconstruction) phase space of the system and, accordingly, the phase trajectory prediction about the temporal evolution of the dynamical parameters. Further in order to implement the ideology simulation of compact geometric attractor and apply a chaos-cybernetic specified phase trajectories algorithm to restore the phase space of the system one should use the concept of average mutual information, and secondly, the concept of using properties of the relevant linear autocorrelation function. In terms of mathematical modeling the problem reduces to the consideration of unambiguous mapping form:

$$F_{i+1} = G(F_i), \tag{5}$$

where $F \in \mathbf{R}^D$ is a vector of environmental state, D is a dimension of the system, i is a discrete time, G is a D -dimensional mapping.

In order to reconstruction a phase space of the radionuclide environment system one should use ideas by to Packard et al [8]. The main idea is that direct use of lagged variables $s(n+\tau)$, where τ is some integer to be defined, results in a coordinate system where a structure of orbits in phase space can be captured. Using a collection of time lags to create a vector in d dimensions,

$$y(n)=[s(n), s(n + \tau),s(n + 2\tau),...,s(n +(d-1)\tau)], \tag{6}$$

the required coordinates are provided. In a nonlinear system, $s(n + j\tau)$ are some unknown nonlinear

ear combination of the actual physical variables. The dimension d is the embedding dimension, d_E (see details, for example, in Refs. [7-9,15-18]). The choice of proper time lag is important for the subsequent reconstruction of phase space. There are known two effective algorithms to solve this problem, namely, method of autocorrelation function $C_L(\delta)$ and an average mutual information approach.

The goal of the embedding dimension determination is to reconstruct a Euclidean space R^d large enough so that the set of points d_A can be unfolded without ambiguity. The embedding dimension, d_E , must be greater, or at least equal, than a dimension of attractor, d_A , i.e. $d_E > d_A$. The correlation integral analysis is one of the widely used techniques to investigate the signatures of chaos in a time series. The analysis uses the correlation integral, $C(r)$, to distinguish between chaotic and stochastic systems.

According to [13], one should calculate the correlation integral $C(r)$. If the time series is characterized by an attractor, then the correlation integral $C(r)$ is related to the radius r as

$$d = \lim_{\substack{r \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \frac{\log C(r)}{\log r}, \quad (7)$$

where d is correlation exponent. If the correlation exponent attains saturation with an increase in the embedding dimension, then the system is generally considered to exhibit chaotic dynamics. The saturation value of correlation exponent is defined as the correlation dimension (d_2) of the attractor (see details in refs. [4,23,24]). As alternative method to computing embedding dimension, one could use an algorithm of the false nearest neighbor points by Kennel et al [9] (look [10-15] too).

The main idea is as follows. In dimension d each vector $\mathbf{y}(k)$ has a nearest neighbour $\mathbf{y}^{NN}(k)$ with nearness in the sense of some distance function. The Euclidean distance in dimension d between $\mathbf{y}(k)$ and $\mathbf{y}^{NN}(k)$ is called as $R_d(k)$:

$$R_d^2(k) = [s(k) - s^{NN}(k)]^2 + [s(k + \tau) - s^{NN}(k + \tau)]^2 + \dots + [s(k + \tau(d-1)) - s^{NN}(k + \tau(d-1))]^2. \quad (8)$$

$R_d(k)$ is presumably small when one has a lot of data, and for a dataset with N measurements, this distance is of order $1/N^{1/d}$. In dimension $d + 1$ this nearest-neighbour distance is changed due to the $(d + 1)$ st coordinates $s(k + \tau)$ and $s^{NN}(k + \tau)$ to

$$R_{d+1}^2(k) = R_d^2(k) + [s(k + \tau) - s^{NN}(k + \tau)]^2. \quad (9)$$

Further one could define some threshold size R_T to decide when neighbours are false. Then if

$$\frac{|s(k + \tau) - s^{NN}(k + \tau)|}{R_d(k)} > R_T, \quad (10)$$

the nearest neighbours at time point k are declared false. Kennel et al. [9] showed that for values in the range $10 \leq R_T \leq 50$ the number of false neighbours identified by this criterion is constant. In practice, the percentage of false nearest neighbours is determined for each dimension d . A value at which the percentage is almost equal to zero can be considered as the embedding dimension.

One of the most important results of a modern chaos theory is that studying the chaotic time series based on the standard linear analysis methods (including standard Fourier analysis) is fundamentally not possible. For this reason, it is not possible to indicate a trajectory of the most probable evolution of dynamic system on the basis of linear analysis methods even when a phase space is reconstructed. For nonlinear systems with a chaotic chaotic dynamics a great interest represents using of invariants which that do not change during evolution of a system. Besides, it is important fulfilling the additional condition of constancy of invariants even under little changes of the initial conditions.

As one of the fractal dimensions (correlation) has been described above, further we consider the Lyapunov exponents. In fact, analysis on the basis of the Lyapunov exponents was carried out to determine a stability of linear and nonlinear systems. In fact a spectrum of the Lyapunov exponents is one of dynamical invariants for non-linear system with chaotic behaviour. As usually, the predictability can be estimated by the Kolmogorov entropy, which is proportional to a sum of positive Lyapunov exponents. The limited predictability of the chaos is quantified by the local and global

Lyapunov exponents, which can be determined from measurements. The Lyapunov exponents are related to the eigenvalues of the linearized dynamics across the attractor. Negative values show stable behaviour while positive values show local unstable behaviour. For chaotic systems, being both stable and unstable, Lyapunov exponents indicate the complexity of the dynamics. The largest positive value determines some average prediction limit. Since the Lyapunov exponents are defined as asymptotic average rates, they are independent of the initial conditions, and hence the choice of trajectory, and they do comprise an invariant measure of the attractor. An estimate of this measure is a sum of the positive Lyapunov exponents. The Kolmogorov entropy measures the average rate at which information about the state is lost with time. The estimate of the dimension of the attractor is provided by the Kaplan and Yorke conjecture (see details in Refs. [7-15]):

$$d_L = j + \frac{\sum_{\alpha=1}^j \lambda_{\alpha}}{|\lambda_{j+1}|}, \quad (11)$$

where j is such that $\sum_{\alpha=1}^j \lambda_{\alpha} > 0$ and $\sum_{\alpha=1}^{j+1} \lambda_{\alpha} < 0$, and the Lyapunov exponents are taken in descending order.

To compute the Lyapunov exponents, one should use a method with linear fitted map, although maps with higher order polynomials can be used too (e.g.[4,13]. Another new approach has been recently developed by Glushkov et al and in using the neural networks technique [17-20]. Summing up above said and results of Refs. [1-3], the whole technique of analysis, processing and forecasting any time series of the radioactive pollutants in different geospheres will be looked as follows (see figure 1).

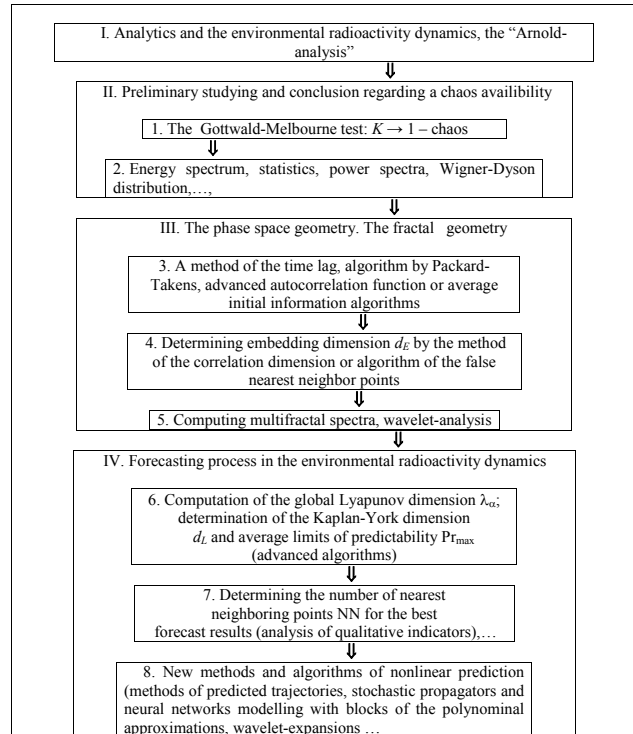


Figure 1. General compact scheme for computation of the characteristics of the environmental radioactivity dynamics time series and a non-linear analysis, modelling and prediction.

The last block indeed includes the methods and algorithms of nonlinear prediction such as methods of predicted trajectories, stochastic propagators and neural networks modelling, renorm-analysis with blocks of the polynomial approximations, wavelet-expansions [4.23,24]. All calculations can be performed with using “Geomath” and “Quantum Chaos” computational codes [4,21-38].

3. Illustrative results and conclusions

As an illustration of the presented approach we have preliminarily studied the temporal dynamics of of the radon pore activity. The data of measurements on the monitoring stations of the Petropavlovsk-Kamchatsky geodynamical poligone [2,3]. It has been earlier shown that the radon density flow can be treated as perspective characteristics in studying geodynamical porcesses in epy Earth’s crust. We have carried out a preliminary computing the time series for the radon pore activity (data from [29,30]; Figure 2)

using the above presented approach. In Table 1 we list the data of the preliminary computation of the key invariants: time lag (τ) correlation dimension (d_2), embedding dimension (d_E), Kaplan-Yorke dimension (d_L), two Lyapunov exponents, the Kolmogorov entropy for the time series of the radon pore activity (preliminary data). The preliminary data indicate on availability of the low- (and indeed middle) dimensional chaos in the time series of the radon pore activity.

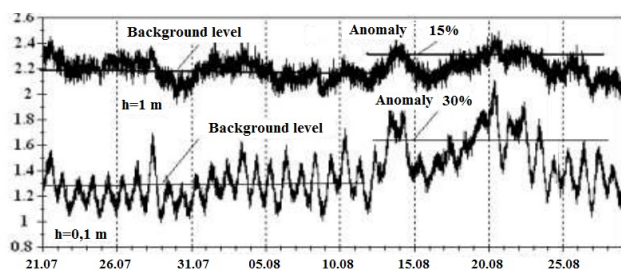


Figure 2 . The temporal dynamics of the radon pore activity at a depth of the sensor arrangement (1.0 m and 0.1 m).

Table 1. Time lag (τ) correlation dimension (d_2), embedding dimension (d_E), Kaplan-Yorke dimension (d_L), two Lyapunov exponents, the Kolmogorov entropy for the time series of the radon pore activity (preliminary data)

τ	d_2	d_E	λ	λ	d_L	K_{entr}
9	5,6	6	0,018	0,001	4,31	0.019

This is in agreement with the fractal picture data [2,3]. To reconstruct the corresponding chaotic attractor, the time delay and embedding dimension were computed on the basis of the methods of autocorrelation function and average mutual information, correlation dimension, false nearest neighbours. The presence of the two (from six) positive λ_i suggests the system broadens in the line of two axes and converges along four axes that in the six-dimensional space.

It is important to underline that the Kaplan-Yorke dimensions, which are also the attractor dimensions, are smaller than the dimensions obtained by the algorithm of false nearest neighbours. Computing K_{entr} and correspondingly an

average limit of predictability can show the limit to which the corresponding amplitude of the average intensity can be provided. In any case, one should keep in mind that usually a limited set of data may probably lead to an underestimation of the actual dimension of the system.

References

[1]. This is in agreement with the fractal picture data [2,3]. To reconstruct the corresponding chaotic attractor, the time delay and embedding dimension were computed on the basis of the methods of autocorrelation function and average mutual information, correlation dimension, false nearest neighbours. The presence of the two (from six) positive λ_i suggests the system broadens in the line of two axes and converges along four axes that in the six-dimensional space. Responses of the atmospheric concentration of radon-222 to the vertical mixing and spatial transportation// Boreal Environm. Res. (Helsinki).-2016.-Vol.21.-P.299–318.

[2]. Parovik R.I., Il'in I.A., Firstov P.P., The mathematical diffusion model of mass transfer of radon (^{222}Rn) in the ground and its exhalation into the surface layer of the atmosphere // Vestnik Kraunts. Earth sciences.-2006.-N1(7).-P.110-114.

[3]. Parovik R.I., Solution of the nonlocal equation of anomalous diffusion-advection of radon in the soil-atmosphere system // Vestnik KRAUNTS. Phys.-Math. science. -2011.-N1(2). -P. 37-44.

[4]. Jacob D.J., Prather M.J., Radon-222 as a test of convective transport in a general circulation model// Tellus.-1990.-Vol.42b-P.118-134.

[5]. Jean-Louis Pinault , Jean-Claude Baubron, Signal processing of diurnal and semidiurnal variations in radon and atmospheric pressure' A new tool for accurate in situ measurement of soil gas velocity, pressure gradient, and tortuosity //Journal of Geophys.Res.-1997.-Vol.102, N8.- P.101-120.

[6]. Chelani A.B. Predicting chaotic time series of PM10 concentration using artificial neural network // Int. J. Environ. Stud. – 2005. – Vol. 62. – P. 181–191

- [7]. Gottwald G.A., Melbourne I., Testing for chaos in deterministic systems with noise// *Physica D.* – 2005. – Vol. 212. – P. 100–110.
- [8]. Packard N.H., Crutchfield J.P., Farmer J.D., Shaw R.S., Geometry from a time series // *Phys. Rev. Lett.* – 1980. – Vol. 45. – P. 712–716.
- [9]. Kennel M, Brown R, Abarbanel H 1992 *Phys. Rev. A.* **45** 3403.
- [10]. Abarbanel H.D.I., Brown R., Sidorowich J.J., Tsimring L.Sh. The analysis of observed chaotic data in physical systems// *Rev. Mod. Phys.* – 1993. – Vol. 65. – P. 1331–1392.
- [11]. Schreiber T. Interdisciplinary application of nonlinear time series methods // *Phys. Rep.* – 1999. – Vol. 308. – P. 1–64.
- [12]. Fraser A.M., Swinney H.L., Independent coordinates for strange attractors from mutual information// *Phys. Rev. A.* – 1986. – Vol. 33. – P. 1134–1140.
- [13]. Grassberger P, Procaccia I. Measuring the strangeness of strange attractors// *Physica D.* – 1983. – Vol. 9. – P. 189–208.
- [14]. Gallager R.G. Information theory and reliable communication – NY: Wiley, 1968. – 608 p.
- [15]. Bunyakova Yu Ya, Glushkov A V 2010 Analysis and forecast of the impact of anthropogenic factors on air basein of an industrial city (Odessa: Ecology).
- [16]. Bunyakova Yu.Ya., Khetselius O.Yu., Non-linear prediction statistical method in forecast of atmospheric pollutants// *Proc. of 8th International Carbon Dioxide Conference.*-2009.-P.T2-098.
- [17]. Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Bruse-ntseva S.V., Zaichko P.A., Ternovsky V.B., Studying interaction dynamics of chaotic systems within a non-linear prediction method: application to neurophysiology// *Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence, Series: Recent Advances in Computer Engineering*, Ed. J.Balicki.-2014.-Vol.21.-P.69-75.
- [18]. Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Buyadzh V.V., Zaichko P., Ternovsky V., Chaos-geometric attractor and quantum neural networks approach to simulation chaotic evolutionary dynamics during perception process// *Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence, Series: Recent Advances in Computer Engineering*, Ed. J.Balicki.-2014.-Vol.21.-P.143-150.
- [19]. Glushkov A.V., Khokhlov V.N., Prepelitsa G.P., Tsenenko I.A. Temporal variability of the atmosphere ozone content: Effect of North-Atlantic oscillation// *Optics of atmosphere and ocean.*-2004.-Vol.14,N7.-p.219-223.
- [20]. Glushkov A.V., Kuzakon' V.M., Khetselius O.Yu., Bunyakova Yu.Ya., Zaichko P.A. Geometry of Chaos: Consistent combined approach to treating chaotic dynamics atmospheric pollutants and its forecasting// *Proceedings of International Geometry Center.*-2013.-Vol. 6,N3.-P.6-13.
- [21]. Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Bunyakova Yu.Ya., Prepelitsa G.P., Solyanikova E.P., Serga E., Non-linear prediction method in short-range forecast of atmospheric pollutants: low-dimensional chaos// *Dynamical Systems - Theory and Applications (Lodz).*-2011.-P.LIF111.
- [22]. Khetselius O.Yu., Forecasting evolutionary dynamics of chaotic systems using advanced non-linear prediction method// *Dynamical Systems – Theory and Applications*, Eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J. Mrozowski.-2013.-Vol.1.-P.145-152.
- [23]. Glushkov A.V., Kuzakon V.M., Ternovsky V.B., Buyadzh V.V., Dynamics of laser systems with absorbing cell and backward-wave tubes with elements of a chaos// *Dynamical Systems – Theory and Applications*, Eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J. Mrozowski.-2013.-Vol.T1.-P.461-466.
- [24]. Buyadzh V.V., Glushkov A.V., Mansarliysky V.F., Ignatenko A.V., Svinarenko A.A., Spectroscopy of atoms in a strong laser field: New method to sensing AC Stark effect, multiphoton resonances parameters and ionization cross-sections//*Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2015.-Vol.12,N4.-P.27-36.
- [25]. Glushkov A.V., Mansarliysky V.F., Khetselius O.Yu., Ignatenko A.V., Smirnov A., Prepelitsa G.P., Collisional shift of hyperfine line for thallium in an atmosphere of the buffer

- inert gas // *Journal of Physics: C Series (IOP, London, UK)*.-2017.-Vol.810.-P. 012034.
- [26]. Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Gurskaya M., Kuznetsova A.A., Ponomarenko E.L., Ternovsky E., Relativistic theory of excitation and ionization of Rydberg atoms in a Black-body radiation field//*J. Phys.: Conf. Series*.-2017.-Vol.810.-P. 012047.
- [27]. Glushkov A.V., Spectroscopy of atom and nucleus in a strong laser field: Stark effect and multiphoton Resonances// *J.Phys.: Conf. Series (IOP)*.-2014.-Vol.548.-P.012020.
- [28]. Glushkov A.V., Relativistic Quantum Theory. Quantum mechanics of Atomic Systems.- Odessa: Astroprint, 2008. - 700P.
- [29]. Svinarenko A.A., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Ternovsky V.B., Dubrovskaya Yu.V., Kuznetsova A.A., Buyadzhi V.V., Theoretical Spectroscopy of Rare-Earth Elements: Spectra and Autoionization Resonances// *Rare Earth Element*, Ed. Jose E. A. Orjuela.- *InTech*.-2017.-P.83-104 (DOI: 10.5772/intechopen.69314).
- [30]. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Kuznetsova A.A., Bashkarev P.G., Relativistic Perturbation Theory Formalism to Computing Spectra and Radiation Characteristics: Application to Heavy Element// *Recent Studies in Perturbation Theory*, Ed. Dimo I. Uzunov.- *InTech*.-2017.-P.131-150 (DOI: 10.5772/intechopen.69102).
- [31]. Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Chernyakova Yu.G., Svinarenko A.A. Cooperative laser-electron-nuclear processes: QED calculation of electron satellites spectra for multicharged ion in laser field//*Int. Journ. Quant. Chem.*- 2004.-Vol. 99,N6.-P.889-893.
- [32]. Glushkov A.V., Negative ions of inert gases// *JETP Lett.*-1992.-Vol.55, Issue 2.-P.97-100.
- [33]. Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E., High Order Corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the Model Zeroth Approximation, Mg-Like and Ne-Like Ions//*Phys.Scripta*.-1985.-Vol.32,N5.-P.513-522.
- [34]. Glushkov A.V., Ivanov L.N., Ivanova E.P., Radiation decay of atomic states. Generalized energy approach// *Autoionization Phenomena in Atoms*.- M.: Moscow State University.-1986. -P.58-160.
- [35]. Glushkov A.V., Ivanov L.N., Radiation decay of atomic states: atomic residue polarization and gauge noninvariant contributions// *Phys.Lett.A*.-1992.-Vol. 170, N1.-P.33-36.
- [36]. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A.A., Relativistic theory of cooperative muon-gamma-nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge// *Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics (Springer)*.-2012.-Vol.22.-P.51-68.
- [37]. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Svinarenko A.A., QED approach to atoms in a laser field: Multi-photon resonances and above threshold ionization//*Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Springer)*.-2008.-Vol.18.-P.543-560.
- [38]. Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Ignatenko A.V., Spectroscopy of autoionization resonances in spectra of the lanthanides atoms// *Photoelectronics*.-2011.-Vol.20.-P. 90-94.
- [39]. Svinarenko A.A., Nikola L.V., Prepelitsa G.P., Tkach T., Mischenko E., The Auger (autoionization) decay of excited states in spectra of multicharged ions: Relativistic theory// *Spectral Lines Shape*.-2010.-Vol.16.-P.94-98.
- [40]. Svinarenko A.A., Spectroscopy of autoionization resonances in spectra of barium: New spectral data // *Phototelectronics*.-2014.-Vol.23.-P.85-90.
- [41]. Malinovskaya S V, Glushkov A V, Khetselius O Yu, Svinarenko A A, Mischenko E.V., Florko T.A., Optimized perturbation theory scheme for calculating the interatomic potentials and hyperfine lines shift for heavy atoms in the buffer inert gas//*Int. Journ.of Quantum Chemistry*.-2009.-Vol.109, Issue 14.-P.3325-3329.
- [42]. Glushkov A V, Ambrosov S V, Loboda A V, Chernyakova Yu, Svinarenko A A , Khetselius O Yu, QED calculation of the superheavy elements ions: energy levels, radiative corrections, and hfs for different nuclear models//*Journal Nucl.Phys. A.: nucl. and hadr. Phys.*-2004.-Vol.734.-P.21.

- [43]. Glushkov A.V., Khetselius O.Y., Malinovskaya S.V., New laser-electron nuclear effects in the nuclear γ transition spectra in atomic and molecular systems//Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Springer).-2008.-Vol.18.-P.525-541.
- [44]. Khetselius O.Yu., Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes// Int. Journ. of Quantum Chemistry.-2009.-Vol.109, Issue 14.-P.3330-3335.
- [45]. Glushkov A V, Ivanov L N, DC strong-field Stark effect: consistent quantum-mechanical approach// Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Phys.-1993.-Vol.26,N14.-P.L379 –386.
- [46]. Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Korchevsky D.A., DC Strong Field Stark Effect for Non-hydrogenic Atoms: Consistent Quantum Mechanical Approach // Int.Journ.Quant.Chem.-2004.-Vol.99,N6.-P.936-939.
- [47]. Glushkov A.V., Relativistic and correlation effects in spectra of atomic systems.-Odessa: Astroprint.-2006.-400P.
- [48]. Glushkov A.V., Atom in electromagnetic field.-Kiev: KNT, 2005.
- [49]. Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Sukharev D.E., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Lovett L., Green's function method in quantum chemistry: New numerical algorithm for the Dirac equation with complex energy and Fermi-model nuclear potential//Int. Journ. Quant.Chem.-2009.- Vol. 109, N8.-P.1717-1727.
- [50]. Glushkov A.V., Kondratenko P.A., Lepikh Ya., Fedchuk A.P., Svinarenko A.A., Lovett L., Electrodynamical and quantum - chemical approaches to modelling the electrochemical and catalytic processes on metals, metal alloys and semiconductors//Int. Journ. Quantum Chem.-2009.-Vol.109,N14.-P.3473-3481.
- [51]. Khetselius O.Yu., Relativistic calculating the hyperfine structure parameters for heavy-elements and laser detecting the isotopes and nuclear reaction products//Phys. Scripta.-2009.-T.135.-P.014023.
- [52]. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Lovett L., Electron- β -Nuclear Spectroscopy of Atoms and Molecules and Chemical Environment Effect on the β -Decay parameters// Advances in the Theory of Atomic and Molecular Systems Dynamics, Spectroscopy, Clusters, and Nanostructures. Series: Progress in Theor. Chem. and Phys. (Springer).-2009.-Vol.20.-P.125-152.
- [53]. Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Khetselius O.Yu., Buyadzhi V.V., Florko T.A., Shakhman A.N., Relativistic Quantum Chemistry: Advanced approach to construction of the Green's function of the Dirac equation with complex energy and mean-field nuclear potential// Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chem. and Physics. Ser.: Progress in Theor. Chem. and Phys., Eds. M. Nascimento, J.Marvani, E.Brändas, G. Delgado-Barrio (Springer).-2015-Vol.29.-P.197-217.
- [54]. Khetselius O.Yu., Optimized perturbation theory to calculating the hyperfine line shift and broadening for heavy atoms in the buffer gas// Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chemistry and Physics. Ser.: Progress in Theor. Chem. and Phys. (Springer).-2015-Vol.29.-P.55-76.
- [55]. Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., New approach to the formation of model potential for valence-electrons//Zhurn.Fizich. Khimii.-1988.-Vol.62(1).-P.100-104.
- [56]. Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Khetselius O.Yu., Fedchuk A.P., Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Wannier-mott excitons and atoms in a DC electric field: photoionization, Stark effect, resonances in the ionization continuum// Sensor Electr. and Microsyst. Techn.-2008.-N4.-P.5-11.
- [57]. Svinarenko A.A., Study of spectra for lanthanides atoms with relativistic many-body perturbation theory: Rydberg resonances// J. Phys.: Conf. Ser. - 2014.-Vol.548.-P.012039.
- [58]. Svinarenko A.A., Ignatenko A.V., Ternovsky V.B., Nikola V.V., Seredenko S.S., Tkach T.B., Advanced relativistic model potential approach to calculation of radiation transition parameters in spectra of multicharged ions// J. Phys.: Conf. Ser. -2014.-Vol.548.-P. 012047.
- [59]. Svinarenko A.A., Khetselius O.Yu., Buy-

- adzhi V.V., Florko T.A., Zaichko P.A., Ponomarenko E.L., Spectroscopy of Rydberg atoms in a Black-body radiation field: Relativistic theory of excitation and ionization// *J. Phys.: Conf. Ser.*-2014.-Vol.548.-P. 012048.
- [60]. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Bunyakova Yu.Ya., Buyadzhi V.V., Brusentseva S.V., Zaichko P.A., Sensing interaction dynamics of chaotic systems within a chaos theory and microsystem technology Geomath with application to neurophysiological systems// *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2014.-Vol. 11,N3.-P.62-69.
- [61]. Glushkov A.V., Energy Approach to Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nuclei collisions// *Low Energy Antiproton Phys. AIP Conference Proceedings.*-2005.-Vol.796 (1).-P.206-210.
- [62]. Sukharev D.E., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., Sensing strong interaction effects in spectroscopy of hadronic atoms// *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2009.-N3.-P.16-21.
- [63]. Khetselius O.Yu., On possibility of sensing nuclei of the rare isotopes by means of laser spectroscopy of hyperfine structure// *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2008.-Vol.3.-P.28-33.
- [64]. Khetselius O.Y., Gurnitskaya E.P., Sensing the hyperfine structure and nuclear quadrupole moment for radium// *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2006.-N2.-P.25-29.
- [65]. Prepelitsa G.P., Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Buyadzhi V.V., Ternovsky V.B., Zaichko P.A., Chaotic dynamics of non-linear processes in atomic and molecular systems in electromagnetic field and semiconductor and fiber laser devices: new approaches, uniformity and charm of chaos// *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2014.-Vol.11,N4.-P.43-57.
- [66]. Khetselius O.Yu., Florko T.A., Svinarenko A.A., Tkach T.B., Radiative and collisional spectroscopy of hyperfine lines of the Li-like heavy ions and Tl atom in an atmosphere of inert gas// *Phys. Scripta.*-2013.-Vol.T153-P.014037.
- [67]. Khetselius O.Yu., Relativistic energy approach to cooperative electron- γ -nuclear processes: NEET Effect// *Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications. Ser.: Progress in Theor. Chem. and Phys. (Springer).*-2012.-Vol.26.-P.217-229.
- [68]. Khetselius O Yu, Relativistic calculation of the hyperfine structure parameters for heavy elements and laser detection of the heavy isotopes// *Phys. Scripta.*-2009.-Vol.T135.-P. 014023.
- [69]. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Gurnitskaya E.P., Loboda A.V., Florko T.A., Sukharev D.E., Lovett L., Gauge-Invariant QED Perturbation Theory Approach to Calculating Nuclear Electric Quadrupole Moments, Hyperfine Structure Constants for Heavy Atoms and Ions// *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics (Springer)*, 2008.-Vol.18.-P.507-524.
- [70]. Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P., Prepelitsa G.P., Consistent QED approach to calculation of electron-collision excitation cross sections and strengths: Ne-like ions// *Int. Journal Quantum Chem.*-2005.-Vol.104, Issue 4.-P.562–569.
- [71]. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V., Optics and spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear processes in atomic and molecular systems - new trend in quantum optics// *Europ. Phys. Journ. ST.*-2008.-Vol. 160, Issue 1.-P.195-204.
- [72]. Malinovskaya S.V., Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Svinarenko A., Bakunina E.V., Florko T.A., The optimized perturbation theory scheme for calculating interatomic potentials and hyperfine lines shift for heavy atoms in buffer inert gas// *Int. Journ. of Quantum Chemistry.*-2009.-Vol.109.-P.3325-3329.
- [73]. Khetselius O.Yu., Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes// *Int. Journ. of Quantum Chemistry.*-2009.-Vol.109,N14.-P.3330-3335.
- [74]. Glushkov A.V., Svinarenko A.A., Khetselius O.Y., Buyadzhi V.V., Florko T.A., Shakhman A., Relativistic quantum chemistry: An Advanced approach to the construc-

- tion of the Green function of the Dirac equation with complex energy and mean-field nuclear potential// *Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chemistry and Physics*.-2015.-Vol.29.-P.197-217.
- [75]. Ternovsky V.B., Glushkov A.V., Zaichko P., Khetselius O.Yu., Florko T.A., New relativistic model potential approach to sensing radiative transitions probabilities in spectra of heavy Rydberg atomic systems/ // *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2015.-Vol.12,N4.-P.19-26.
- [76]. Buyadzhi V.V., Glushkov A.V., Mansarliysky V.F., Ignatenko A.V., Svinarenko A.A., Spectroscopy of atoms in a strong laser field: New method to sensing AC Stark effect, multiphoton resonances parameters and ionization cross-sections//*Sensor Electr. and Microsyst. Techn.*-2015.-Vol.12,N4.-P.27-36.
- [77]. Glushkov A.V., Mansarliysky V.F., Khetselius O.Yu., Ignatenko A.V., Smirnov A., Prepelitsa G., Collisional shift of hyperfine line for thallium in an atmosphere of the buffer inert gas//*J. Phys.: Conf. Ser. (IOP)*.-2017.-Vol.810.-P. 012034.
- [78]. Buyadzhi V.V., Zaichko P.A., Gurskaya M., Kuznetsova A.A., Ponomarenko E.L., Ternovsky E., Relativistic theory of excitation and ionization of Rydberg atoms in a Black-body radiation field//*J. Phys.: Conf. Series*.-2017.-Vol.810.-P. 012047.
- [79]. Ivanova E P, Glushkov A V, Theoretical investigation of spectra of multicharged ions of F-like and Ne-like isoelectronic sequences// *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*.-1986.-Vol.36, Issue 2.-P. 127-145.
- [80]. Khetselius O.Yu., Hyperfine structure of atomic spectra. - Odessa: Astroprint, 2008.-210P.
- [81]. Khetselius O.Yu., Hyperfine structure of radium// *Photoelectronics*.-2005.-N14.-P.83-85.
- [82]. Khetselius O., Spectroscopy of cooperative electron-gamma-nuclear processes in heavy atoms: NEET effect// *J. Phys.: Conf. Ser.*-2012.- Vol.397.-P.012012.
- [83]. Khetselius O Yu, Relativistic calculation of the hyperfine structure parameters for heavy elements and laser detection of the heavy isotopes// *Phys. Scripta*.-2009.-Vol.T135.-P.014023.
- [84]. Buyadzhi V V, Laser multiphoton spectroscopy of atom embedded in Debye plasmas: multiphoton resonances and transitions// *Photoelectronics*.-2015.-Issue 24.-P.128-133.

Стаття надійшла до редакції 12.09.2017 р.

PACS 32.80Dz; UDC 539.192

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111406>

NEW APPROACH AND MICROSYSTEM TECHNOLOGY OF ADVANCED NON-LINEAR ANALYSIS AND MODELLING CHAOTIC ENVIRONMENTAL RADIOACTIVITY DYNAMICS

A. V. Glushkov, Yu. Ya. Bunyakova, V. V. Buyadzhi, Yu. V. Dubrovskaya, A. A. Kuznetsova, O. Yu. Khetselius

Odessa State Environmental University, L'vovskaya, 15, Odessa, 65016, Ukraine
E-mail: odeku.intsci@gmail.com

Summary

The aim of the work is to develop and present a new approach and correspondingly a new microsystem technology for advanced non-linear analysis, modelling and forecasting the environmental radioactivity dynamics and apply it to studying a temporal dynamics of the atmospheric radionuclides such as radon and others. The new approach includes a qualitative analysis of dynamical problem of the typical environmental radioactivity dynamics, reconstruction of the phase space with using methods of correlation dimension algorithm and false nearest neighbor points. To reconstruct the corresponding chaotic attractor, the time delay and embedding dimension were computed on the basis of the methods of autocorrelation function and average mutual information. The correlation integral algorithm has been used to compute the fractal dimension. The approach includes an effective computing of the dynamic and topological invariants of a chaotic system, including the global Lyapunov's exponents, the Kaplan-York dimension, Kolmogorov entropy and others.

The forecasting block contains new (in a theory of environmental radioactivity dynamics and environmental protection) methods and algorithms of nonlinear prediction such as methods of predicted trajectories and neural networks modelling.

As an illustration, the first data of analysis of the time series for the radon pore activity are presented and indicated on availability of the low- (and indeed middle) dimensional chaos. The data of measurements on the monitoring stations of the Petropavlovsk-Kamchatsky geodynamical poligone have been analysed. The presence of the two (from six) positive the global Lyapunov's exponents suggests the system broadens in the line of two axes and converges along four axes that in the six-dimensional space. It is important to underline that the Kaplan-Yorke dimensions, which are also the attractor dimensions, are smaller than the dimensions obtained by the algorithm of false nearest neighbours. It has been confirmed that the radon density flow can be treated as perspective characteristics in studying geodynamical porcesses in the Earth's crust.

Keywords: radionuclides concentration dynamics, new mathematical models, new microsystem technologies, time series analysis and prediction modelling

PACS 32.80Dz; УДК 539.192

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111406>

НОВИЙ ПІДХІД І МІКРОСИСТЕМНА ТЕХНОЛОГІЯ ВДОСКОНАЛЕНОГО НЕЛІНІЙНОГО АНАЛІЗУ І МОДЕЛЮВАННЯ ХАОТИЧНОЇ ДИНАМІКИ КОНЦЕНТРАЦІЙ РАДІОНУКЛІДІВ У НАВКОЛИШНЬОМУ СЕРЕДОВИЩУ

*О. В. Глушков, Ю. Я. Бунякова, В. В. Буяджи, Ю. В. Дубровська, Г. О. Кузнецова,
О. Ю. Хецеліус*

Одеський державний екологічний університет, Львівська 15, Одеса, 65016
E-mail: odeku.intsci@gmail.com

Реферат

Мета роботи полягає у розробці та презентації нового підходу та, відповідно, нової мікросистемної технології для поглибленого, вдосконаленого кількісного дослідження часової та просторової динаміки концентрацій радіоактивних забруднюючих навколишнє середовище (атмосферу, гідросферу тощо) речовин та застосування її до вивчення характеристик часових рядів концентрацій забруднюючих атмосферу радіонуклідів типу радону та інших.

Новий підхід включає якісний та кількісний аналіз проблеми часової динаміки радіоактивності довкілля, реконструкцію фазового простору з використанням методів алгоритму кореляційного інтегралу та методу помилкових сусідніх точок. Для реконструкції відповідного хаотичного атрактора, обчислення затримки часу та розмірності вкладення виконане на основі методів автокореляційної функції та середньої взаємної інформації. Алгоритм кореляційного інтеграла використаний для обчислення кореляційної розмірності. Підхід природньо включає ефективне обчислення динамічних та топологічних інваріантів хаотичної системи, в тому числі глобальних показників Ляпунова, розмірності Каплана-Йорка, ентропії Колмогорова та інших.

Прогнозний блок містить нові (вперше в теорії динаміки радіоактивності навколишнього середовища та охорону довкілля) методи та алгоритми нелінійного прогнозування, такі як методи передбачених траєкторій та моделювання на основі нейронних мереж.

Як ілюстрація, представлені результати аналізу даних по поровій активності радону і вперше вказано на можливу наявність елементів хаосу. Проаналізовано дані вимірювань на станціях спостережень на геодинамічному полігоні Петропавловськ-Камчатського. Наявність двох (з шести) позитивних глобальних показників Ляпунова передбачає, що система розширюється в лінії двох осей і сходиться уздовж чотирьох осей у 6-мірному просторі. Важливо підкреслити, що розмірність Каплана-Йорка, яка є також розмірністю атрактора, менша, ніж розмірність, отримана на основі алгоритму фальшивих найближчих сусідів. Підтверджено, що потік густини радону можна розглядати як перспективну характеристику при вивченні геодинамічних поршень у земній корі.

Ключові слова: динаміка концентрацій радіонуклідів, нові математичні моделі, нові мікросистемні технології, аналіз та прогнозування часових рядів

ОПТИЧНІ, ОПТОЕЛЕКТРОННІ І РАДІАЦІЙНІ СЕНСОРИ

OPTICAL AND OPTOELECTRONIC AND RADIATION SENSORS

PACS 07.57.Kp, 85.30.Tv УДК 621.382.323, 621.3.029.65, 621.3.029.66
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.109330>

ОДНОЭЛЕМЕНТНОЕ ПРИЕМНОЕ УСТРОЙСТВО ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ ИЗЛУЧЕНИЯ СУБ-ТГц/ТГц ДИАПАЗОНА НА ОСНОВЕ КРЕМНИЕВОГО ПОЛЕВОГО ТРАНЗИСТОРА

И. А. Лысюк, А. Г. Голенков, С. Е. Духнин, В. П. Рева, А. В. Шевчик-Шекера, Ф. Ф. Сизов

Институт физики полупроводников им. В. Е. Лашкарёва НАН Украины,
03028, Киев, пр. Науки 41, тел./факс 525-62-96
lysiuk@isp.kiev.ua, golenkov@isp.kiev.ua, sedukhnin@gmail.com, vpreva@isp.kiev.ua,
annashsh82@gmail.com, sizov@isp.kiev.ua

ОДНОЭЛЕМЕНТНОЕ ПРИЕМНОЕ УСТРОЙСТВО ДЛЯ РЕГИСТРАЦИИ ИЗЛУЧЕНИЯ СУБ-ТГц/ТГц ДИАПАЗОНА НА ОСНОВЕ КРЕМНИЕВОГО ПОЛЕВОГО ТРАНЗИСТОРА

И. А. Лысюк, А. Г. Голенков, С. Е. Духнин, В. П. Рева, А. В. Шевчик-Шекера, Ф. Ф. Сизов

Аннотация. В работе рассмотрено приемное устройство для регистрации электромагнитного излучения суб-ТГц/ТГц диапазона спектра, чувствительным элементом которого есть кремниевый полевой транзистор, подключенный к антенне затвором и истоком. Описано геометрию чувствительного элемента, принцип работы приемного устройства, методику измерения чувствительности и мощности эквивалентной шуму (*NEP*). Для приемного устройства разработана и изготовлена съёмная система асферических линз, приведена измеренная функция рассеяния точки на частоте излучения 140 ГГц. На этой же частоте излучения протестирована работа приемного устройства, измерена чувствительность $S=2,8 \times 10^5$ В/Вт и мощность эквивалентная шуму $NEP=4,3 \times 10^{-10}$ Вт (Гц)^{-1/2}.

Ключевые слова: суб-ТГц, ТГц, Si-MOSFET, полевой транзистор, *NEP*, приемник

ОДНОЕЛЕМЕНТНЫЙ ПРИЙМАЛЬНЫЙ ПРИБОР ДЛЯ РЕЕСТРАЦИИ ВИПРОМІНЮВАННЯ СУБ-ТГц/ТГц ДІАПАЗОНА НА ОСНОВІ КРЕМНІЄВОГО ПОЛЬОВОГО ТРАНЗИСТОРА

I. O. Lysiuk, O. G. Golenkov, S. E. Dukhnin, V. P. Reva, A. V. Shevchik-Shekera, F. F. Sizov

Анотація. В роботі розглянуто приймальний пристрій для реєстрації електромагнітного випромінювання суб-ТГц/ТГц діапазону спектра, чутливим елементом якого є кремнієвий польовий транзистор, підключений до антени затвором й витоком. Описано геометрію чутливого елемента, принцип роботи приймального пристрою, методику вимірювання чутливості і потужності еквівалентної шуму (*NEP*). Для приймального пристрою розроблена та виготовлена з'йомна система лінз, наведено виміряну функцію розсіяння точки на частоті джерела випромінювання 140 ГГц. На цій частоті випромінювання випробувано роботу приймального пристрою, виміряно чутливість $S=2,8 \times 10^5$ В/Вт та потужність еквівалентну шуму $NEP=4,3 \times 10^{-10}$ Вт (Гц)^{-1/2}.

Ключові слова: суб-ТГц, ТГц, Si-MOSFET, польовий транзистор, NEP, приймач

SUB-THz/THz RADIATION DETECTOR DEVICE BASED ON Si-MOSFET

I. O. Lysiuk, A. G. Golenkov, S. E. Dukhnin, V. P. Reva, A. V. Shevchik-Shekera, F. F. Sizov

Abstract. A sub-THz/THz radiation detector device based on Si-MOSFET has been presented. Si-MOSFET source and gate connected to an antenna serves as a detector element. Geometry of the Si-MOSFET antenna, principle of device operation, method of estimating the sensitivity and noise equivalent power (*NEP*) have been described. A removable system of aspheric lenses has been developed and made for this detector device, a measured point spread function of the system of aspheric lenses has been given at the frequency 140 GHz. The detector device has been tested at the same frequency; sensitivity and NEP of the detector device have been estimated and they are equal to $S=2.8 \times 10^5$ V/W, $NEP=4.3 \times 10^{-10}$ W (Hz)^{-1/2}, accordingly.

Keywords: sub-THz, THz, Si-MOSFET, NEP, detector

Введение

Электромагнитное излучение субтерагерцового и терагерцового (суб-ТГц/ТГц) диапазона спектра активно используется в биологии, медицине, системах безопасности и контроля, а также других областях науки и техники [1, 2]. Одним из важных направлений является дистанционный неразрушающий контроль скрытых предметов находящихся в неметаллических контейнерах изготовленных

из материалов, прозрачных в терагерцовом диапазоне (бумага, пластик, пенопласт, резина, ткань, керамика и др.). Эти и другие приложения требуют надежных, дешевых, чувствительных приемников излучения, работающих при комнатных температурах.

Как правило, мощность эквивалентная шуму *NEP* (noise equivalent power) неохлаждаемых или слабоохлаждаемых приемников суб-ТГц/ТГц излучения находятся в диапазоне $NEP = 10^{-9} \dots 10^{-11}$ Вт/Гц^{1/2}.

Среди предложенных в последнее время принципов детектирования суб-ТГц/ТГц излучения можно выделить приемник излучения, основанный на эффекте выпрямления высокочастотного индуцированного тока в канале полевого транзистора обусловленного нелинейностью электрических характеристик транзистора [3-5] или генерации плазменных колебаний [6] в канале. При относительно небольшой стоимости единицы продукции использование стандартной кремниевой технологии для изготовления полевых транзисторов как приемников суб-ТГц/ТГц излучения позволяет улучшить стабильность и повторяемость их характеристик.

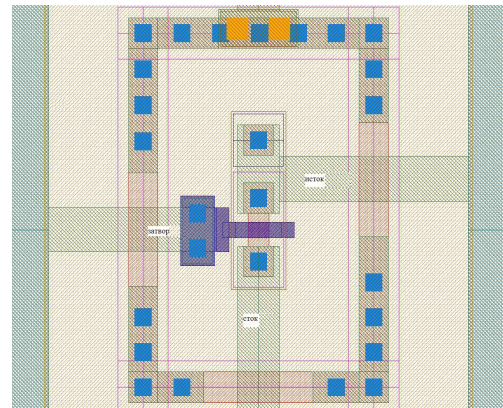
В работе рассмотрена возможность использования в качестве суб-ТГц/ТГц приемников кремниевых металл-оксид-полупроводниковых полевых транзисторов (Si-MOSFET, silicon metal – oxide – semiconductor field – effect transistor) [3-4] и проверена его работа на частоте 140 ГГц.

Для регистрации суб-ТГц/ТГц излучения предложено приемное устройство, состоящее из Si-MOSFET транзистора с подключенной к нему антенной и усилителем. В приемном устройстве предусмотрена съемная сборка из асферических линз, которая используется при необходимости для фокусировки суб-ТГц/ТГц излучения на чувствительный элемент.

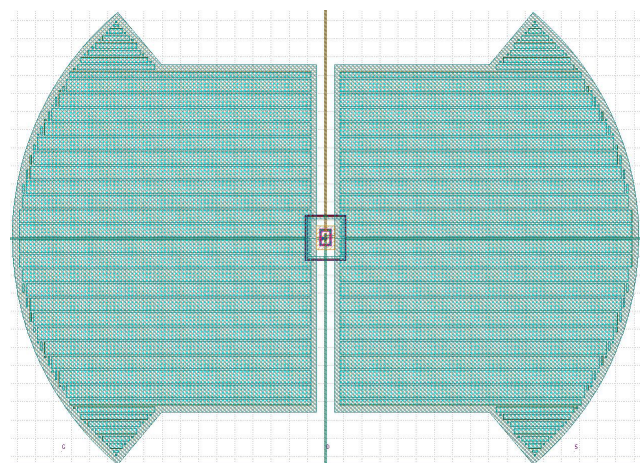
Приемный элемент Si-MOSFET транзистор

В качестве приемника был использован *n*-канальный кремниевый Si-MOSFET транзистор с подключенной между затвором и истоком антенной (рис. 1 а). Для изготовления приемника был использован 350 нм CMOS технологический процесс фирмы X-Fab Semiconductor Foundries AG. Процесс включает изготовление *n*-канальных MOSFET транзисторов в изолированном «кармане» (ISOMOS), 3 слоя металлической разводки шин, поликремниевые конденсаторы на 0,001 Ом кремниевой подложке *p*-типа, ориентации $\langle 100 \rangle$, с эпитаксиальным слоем $(8,0 \pm 1.2)$ Ом см. После изготовления транзисторов подложка была утонена до толщины 290 мкм. Геометрические размеры транзистора – ширина канала $t=0,5$ мкм, длина канала $l=0,35$ мкм. Видно, что габаритные размеры антенны (длина $a=350$ мкм, ширина $b=190$ мкм, радиус кривизны $r=170$ мкм) намного больше размера Si-MOSFET транзистора (см. рис 1 б).

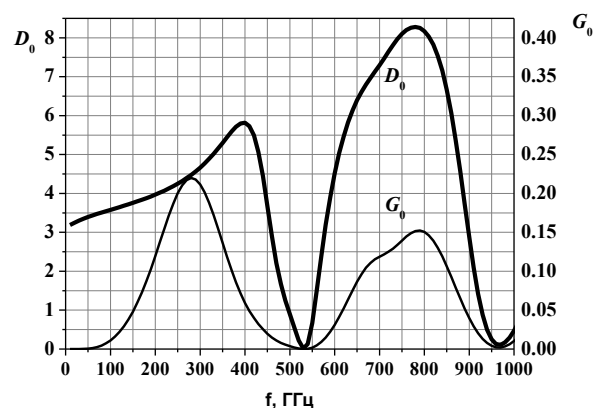
Антенна оптимизирована для детектирования на частоте 280 ГГц. Рассчитанные спектральные характеристики направленности D_0 и коэффициента усиления G_0 [7] представлены на рис 1 в).



(а)



(б)



(в)

Рис. 1 Геометрия приемника излучения с антенной: а) топология *n*-канального кремниевый МОП-транзистора; б) внешний вид антенны (габаритные размеры 190 и 350 мкм, радиус кривизны $r=170$ мкм), в) рассчитанные спектральные характеристики направленности D_0 и коэффициента усиления G_0 спроектированной антенны.

Принцип работы и конструкция

При попадании на антенну транзистора суб-ТГц/ТГц излучения в антенне индуцируется высокочастотный ток, часть этого тока попадает в канал Si-MOSFET транзистора и выпрямляется транзистором за счёт его нелинейной характеристики, в результате на истоке и стоке появляется постоянное напряжение, которое усиливается усилителем, с коэффициентом усиления по напряжению 2000. Выход усилителя является выходом приёмного устройства.

При использовании приемного устройства рекомендуется увеличивать мощность излучения, которая попадает на чувствительный элемент с помощью линз или зеркал. Для этого суб-ТГц/ТГц излучение фокусируется внешней линзой или зеркалом на антенну Si-MOSFET транзистора.

Для фокусировки излучения на антенну транзистора можно также использовать съёмную систему линз, которая состоит из двух плоско-выпуклых асферических линз, поверхность – гиперболоид, которая позволяет скорректировать aberrации и сфокусировать излучение в минимальное по размерам пятно.

На рис. 2. представлены фотография спроектированного и изготовленного суб-ТГц/ТГц приёмного устройства (а), а также схема его тестирования со съёмной сборкой из асферических линз (б).

Материалом для съёмной системы линз выбран материал 3D печати – полистирол (HIPS), показатель преломления которого $n=1,56$. HIPS имеет однородное стабильное пропускание около 80-90%, начиная с длины волны ~ 200 мкм. Диаметр фокусирующих линз $D = 36$ мм, относительное отверстие линз $D/f=1/1.38$. Для изготовления линз и корпуса использована аддитивная технология 3D печати, позволяющая с точностью до 100 мкм, по цифровой модели, изготовить изделия со сложными поверхностями, по доступной цене.

На рис. 3 представлена функция рассеяния точки от 140 ГГц источника, сфокусированная съёмными асферическими линзами в плоскость приемника (координаты X, Y). Расчетные и экспериментальные данные центрального максимума функции рассеяния точки - диска Эйри (Airy), имеют близкие значения ($D_{Airy-calc} \approx 6,7$ мм, $D_{Airy-meas} \approx 8$ мм), соответственно, этот тип линз может использоваться для терагерцовых систем зрения.



а)



б)

Рис. 2. а) Фотография изготовленного одноэлементного приемного устройства; б) фотография схемы регистрации суб-ТГц/ТГц излучения с использованием источника на 140 ГГц и съёмной сборки из асферических линз.

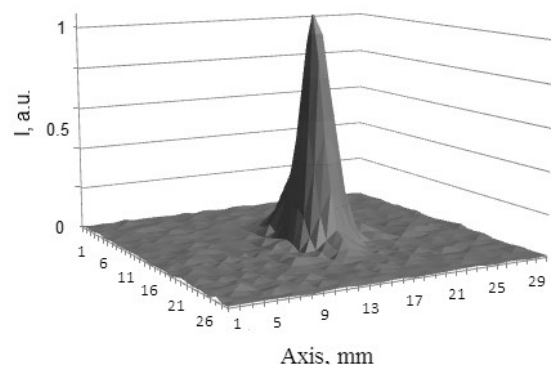


Рис. 3. Функция рассеяния точки, построенной системой асферических линз для приемного устройства на частоте 140 ГГц.

Методика измерения чувствительности и NEP приемника излучения

Одним из основных параметров приемника излучения является *NEP* (noise equivalent power) - мощность, эквивалентная шуму. Значение *NEP* определяет минимальную мощность излучения, которое попадает на приемник и которую он может регистрировать, при условии, что отношение сигнал/шум равно единице.

Для определения *NEP* приемника необходимо знать его чувствительность и шум:

$$NEP = \frac{U_{noise}}{S}, \quad (1)$$

где U_{noise} - амплитуда шума в полосе частот 1 Гц, S - чувствительность приемника.

Чувствительность приемника определяется отношением изменения напряжения U на приемнике при поглощении приемником излучения мощности W :

$$S = \frac{U}{W}. \quad (2)$$

Мощность, которая попадает на приемник, определялась интегрированием распределения интенсивности излучения по площади антенны. Для упрощения расчетов, площадь антенны считалась прямоугольником со сторонами $a=350$ мкм и $b=190$ мкм. Пространственное распределение интенсивности и мощность пучка в плоскости расположения приемника измерялась экспериментально. Для удобства интегрирования экспериментальная кривая может быть аппроксимирована функцией Гаусса.

Источник излучения модулировался на частоте 49 Гц. Выпрямленное высокочастотное напряжение кремниевым полевым транзистором усиливалось усилителем, амплитуда выпрямленного напряжения на выходе усилителя измерялась осциллографом Tektronix TDS 2012. Шумы приемного устройства в отсутствии излучения измерялись синхронным детектором (lock-in amplifier) SR830.

Результаты измерений и расчетов

Приемник освещался 140 ГГц источником излучения по схеме, показанной на рис. 4, из-

лучение от источника фокусировалось на приемнике внешней фторопластовой линзой.

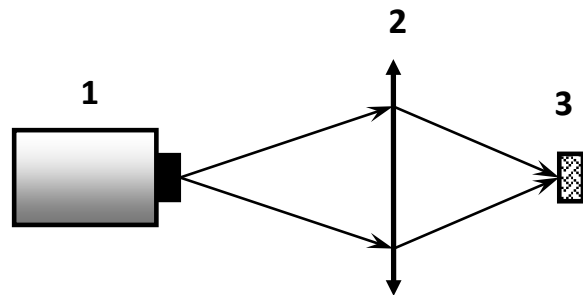


Рис. 4. Схема для измерения отклика, распределения интенсивности и мощности излучения в плоскости расположения детектора: 1 - источник излучения с частотой 140 ГГц, 2 - фторопластовая линза, 3 - приемник излучения (Si-MOSFET транзистор – для измерения отклика, пироэлектрик МГ-30 – для измерения распределения интенсивности, THZ12D-35-VP – для измерения мощности).

Для измерения пространственного распределения интенсивности излучения использовалась автоматизированная двухкоординатная оптическая система сканирования с пироэлектрическим приёмником излучения МГ-30. Размер чувствительного элемента 1×1 мм. Полученные кривые нормировались по максимуму, результат в виде пространственного распределения интенсивности представлен на рис. 5.

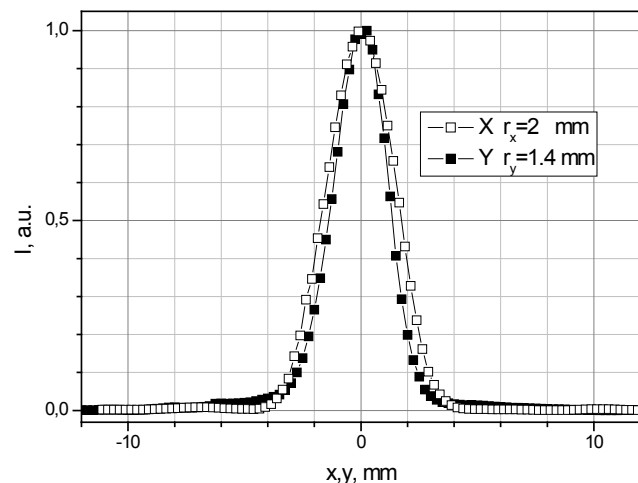


Рис. 5. Распределение интенсивности вдоль осей X, Y в плоскости перпендикулярной к оптической оси.

Главный максимум распределения интенсивности в обоих взаимно-перпендикулярных срезах аппроксимируем функцией распределения Гаусса:

$$I(x, y) = \frac{P}{B} e^{-\frac{x^2}{r_x^2} - \frac{y^2}{r_y^2}}, \quad (3)$$

где B – нормировочный коэффициент, и $B = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{r_x^2} - \frac{y^2}{r_y^2}} dx dy = \pi r_x r_y$, P – мощность излучения от источника, сфокусированная на плоскость

расположения приемника. Изменяя расстояние, где интенсивность в основном максимуме уменьшается в e раз, находим характерные размеры пространственного распределения интенсивности (3) $r_x=2$ мм по горизонтали и $r_y=1.4$ мм по вертикали (см. рис. 5). При этом измеренный диаметр Эйри для фторопластовой линзы приблизительно равен 8 мм, также как и для съемной системы линз.

Для измерения мощности излучения в месте расположения транзисторного приемника излучения устанавливался пироэлектрический измеритель мощности Gentec с детектором THZ12D-35-VP, который имеет рабочую апертуру 12 мм. При измерении мощности излучения источник работал в непрерывном режиме. Из рис. 5 следует, что интенсивность излучения значительно уменьшается на расстоянии большем, чем 6 мм (радиус апертуры измерителя мощности). Поэтому частью мощности излучения, выходящей за апертуру, можно пренебречь.

Мощность, измеренная с помощью THZ12D-35-VP, принимается за мощность P в формуле (3).

Мощность W , которая попадает на площадь детектора, равна:

$$W = \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} I(x, y) dx dy, \quad (4)$$

где a и b – длина и ширина антенны. Используя (3)-(4), получаем выражение для мощности W , которая попадает на антенну:

$$W = \eta P, \quad (5)$$

где η – коэффициент, который указывает, какая

часть мощности в плоскости расположения приемника попадает на приемник, η определяется соотношением

$$\eta = \frac{1}{\pi r_x r_y} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} e^{-\frac{x^2}{r_x^2} - \frac{y^2}{r_y^2}} dx dy. \quad (6)$$

Численное интегрирование (6) дает значение $\eta=7,5 \times 10^{-3}$.

С помощью амплитудной модуляции получена зависимость напряжения амплитуды выхода U приемного устройства от мощности пучка P в сечении, где расположен приемный полевой транзистор (рис. 6). Используя график, определяем коэффициент пропорциональности k в соотношении

$$U = kP \quad (7),$$

где $k = 2,1 \times 10^3$ В/Вт. Согласно формуле (2) и используя (5) и (7) определяем чувствительность S устройства:

$$S = \frac{k}{\eta}, \quad (8),$$

откуда $S=2,8 \times 10^5$ В/Вт.

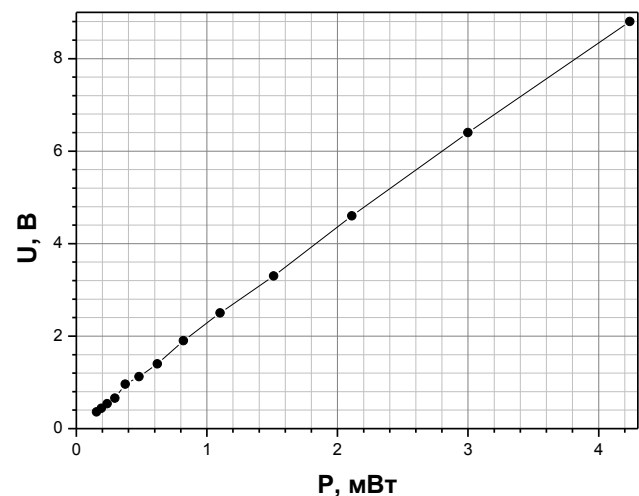


Рис. 6. Зависимость амплитуды напряжения на выходе приемного устройства от мощности излучения сфокусированного в перпендикулярной плоскости к оптической оси, в месте расположения кремниевого полевого транзистора.

Шум приемного устройства U_{noise} при отключенном источнике излучения измерялся с помощью SR830 и равен $U_{noise} = 1,2 \times 10^{-4}$ В (Гц)^{-1/2}.

Рассчитанная по формуле (1) мощность эквивалентная шуму NEP приемного устройства равна $NEP=4,3 \times 10^{-10}$ Вт (Гц) $^{-1/2}$.

Шумы разработанного приемного устройства определялись не только шумами детектора (полевого кремниевого транзистора), но и шумами усилителя. Для уменьшения шумов и улучшения значения NEP нужно использовать усилитель с меньшими шумами.

Выводы

В работе описан принцип и реализация приемного устройства для регистрации электромагнитного излучения суб-ТГц/ТГц диапазона на основе чувствительного элемента – кремниевого полевого транзистора.

Для суб-ТГц/ТГц диапазона спектра показана возможность изготовления линз, по новой технологии, методом послойного создания физического объекта с использованием цифровой 3D-модели. Представлены близкие по значению расчетные и экспериментальные данные центрального максимума функции рассеяния точки -диска Эйри ($D_{\text{Airy-calc}} \approx 6,7$ мм, $D_{\text{Airy-meas}} \approx 8$ мм), что показывает возможность применения высокоточной 100 мкм технологии 3D печати для изготовления оптических деталей, работающих в миллиметровом диапазоне спектра.

Проведена оценка основных параметров разработанного приёмника суб-ТГц/ТГц излучения, таких как чувствительность и мощность, эквивалентная шуму.

На частоте 140 ГГц чувствительность равна $S=2,8 \times 10^5$ В/Вт, мощность эквивалентная шуму составляет $NEP=4,3 \times 10^{-10}$ Вт (Гц) $^{-1/2}$.

Следующим шагом, было бы целесообразно создание интегрированного приёмника излучения вместе с усилителем изготовленном на одном кристалле.

Список использованной литературы

[1]. Sizov F., Rogalsky A. THz detectors// Progress in Quantum Electronics., 34. pp. 278-347 (2010).

[2]. D. Saeedkia (ed.), Handbook of terahertz technology for imaging, sensing and communications. Woodhead Publishing, Oxford Cambridge Philadelphia New Delhi, 662 p., (2013).

[3]. M. Sakhno, F. Sizov, A. Golenkov. Uncooled THz/sub-THz Rectifying Detectors: FET vs. SBD // Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves, 34 (12), pp. 798-814 (2013).

[4]. Sub-THz radiation room temperature sensitivity of long-channel silicon field effect transistors. F. Sizov, A. Golenkov, D. But, M. Sakhno, V. Reva *Optoelectronics Review* 20(20)DOI: 10.2478/s11772-012-0024-z

[5]. A. G. Golenkov, F. F. Sizov. Performance limits of terahertz zero biased rectifying direct detection // Semiconductor Physics, Quantum Electronic & Optoelectronics. 19 (2), pp. 129-138 (2016).

[6]. M. Dyakonov, M. Shur. Plasma wave electronics: Novel terahertz devices using two dimensional electron fluid // *IEEE Trans. Electron Devices*, 43, pp. 1640-1645 (1996).

[7]. C. A. Balanis. Antenna Theory Analysis and Design, 3d Edition, Wiley, New Jersey, 159 p., (2005).

Стаття надійшла до редакції 31.08.2017 р.

PACS 07.57.Kp, 85.30.Tv UDC 621.382.323, 621.3.029.65, 621.3.029.66
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.109330>

SUB-THz/THz RADIATION DETECTOR DEVICE BASED ON Si-MOSFET

I. O. Lysiuk, A. G. Golenkov, S. E. Dukhnin, V. P. Reva, A. V. Shevchik-Shekera, F. F. Sizov

V. E. Lashkaryov Institute of semiconductor physics, NAS of Ukraine
03028, Kyiv, pr. Nauki 41, tel/fax 525-62-96, lysiuk@isp.kiev.ua

Summary

The aim of the work was to develop, produce and measure the sensitivity and NEP of the uncooled sub-THz/THz radiation detector device based on a Si-MOSFET sensitive element. To manufacture Si-MOSFET, 350-nm CMOS technological process was used. The system of aspheric lenses was produced with 3D printer. Spatial distribution of the radiation intensity in the plane of sensitive element location was ascertained by scanning. The transferred power to the antenna of sensitive element was obtained by integration of the radiation intensity over the antenna area. The sensitivity and NEP of detector device at the radiation frequency 140 GHz were estimated as follows: $S=2.8 \times 10^5$ V/W_T та $NEP=4.3 \times 10^{-10}$ W_T (Hz)^{-1/2}. The obtained values of sensitivity and NEP allow making the conclusion that is detector device can be used to detect sub-THz/THz electromagnetic radiation.

Keywords: sub-THz, THz, Si-MOSFET, NEP, detector

PACS 07.57.Kp, 85.30.Tv УДК 621.382.323, 621.3.029.65, 621.3.029.66
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.109330>

ОДНОЕЛЕМЕНТНИЙ ПРИЙМАЛЬНИЙ ПРИСТРІЙ ДЛЯ РЕЄСТРАЦІЇ ВИПРОМІНЮВАННЯ СУБ-ТГц/ТГц ДІАПАЗОНА НА ОСНОВІ КРЕМНІЄВОГО ПОЛЬОВОГО ТРАНЗИСТОРА

I. O. Lysiuk, O. G. Golenkov, S. E. Dukhnin, V. P. Reva, A. V. Shevchik-Shekera, F. F. Sizov

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України,
03028, Київ, пр. Науки 41, тел./факс 525-62-96

Реферат

Метою роботи було розробка і виготовлення неохолоджуваного приймального пристрою для детектування електромагнітного випромінювання суб-ТГц/ТГц діапазону спектру чутливим елементом якого є кремнієвий польовий транзистор, підключений до антени затвором й витоком та визначення основних параметрів приймального пристрою: чутливості та потужності еквівалентної шуму (NEP). Для виготовлення кремнієвого польового транзистору використано

350 нм CMOS технологічний процес. Систему асферичних лінз отримано за допомогою 3D друку. Скануванням визначено просторовий розподіл інтенсивності в площині знаходження чутливого елемента приймального пристрою. Потужність, що падає на антену чутливого елемента пристрою отримано шляхом інтегрування просторового розподілу інтенсивності по площі антени. Визначено параметри приймального пристрою на частоті випромінювання 140 ГГц: чутливість $S=2,8 \times 10^5$ В/Вт та $NEP=4,3 \times 10^{-10}$ Вт (Гц) $^{-1/2}$. Отримані значення чутливості та NEP дозволяють зробити висновок, що даний приймальний пристрій може бути застосований для реєстрації електромагнітного суб-ТГц/ТГц випромінювання.

Ключові слова: суб-ТГц, ТГц, Si-MOSFET, польовий транзистор, NEP, приймач

АКУСТОЕЛЕКТРОННІ СЕНСОРИ

ACOUSTOELECTRONIC SENSORS

УДК 531:535 PACS 0707 Df, 02070 Dh
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111407>

ФОРМУВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПРИСТРОЇВ НА ПАХ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОЇ ПОЛЯРИЗАЦІЇ

Я. І. Лепіх

Міжвідомчий науково-навчальний фізико-технічний центр МОН і НАН України при
Одеському національному університеті імені І. І. Мечникова,
вул. Дворянська, 2, 65082, Одеса, Україна, e-mail: ndl_lepikh@onu.edu.ua

ФОРМУВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПРИСТРОЇВ НА ПАХ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОЇ ПОЛЯРИЗАЦІЇ

Я. І. Лепіх

Анотація. Описані принцип, конструктивні і технологічні рішення формування основних характеристик пристроїв на поверхневих акустичних хвилях (ПАХ) з п'єзоелектричним звукопроводом з використанням нового методу. Суть метода полягає у формуванні шляхом селективної поляризації п'єзоактивних ділянок на звукопроводі з конфігурацією їх границь, що мають форму огинаючої заданої імпульсної характеристики пристрою на ПАХ.

Ключові слова: пристрій на поверхневих акустичних хвилях, п'єзокерамічний звукопровід, селективна поляризація

FORMATION OF THE DEVICES ON THE SAW CHARACTERISTICS BY A METHOD OF SELECTIVE POLARIZATION

Ya. I. Lepikh

Abstract. A principle, constructive and technological solving of the formation of the device on the surface acoustic waves with piezoelectric acoustic duct basic characteristics with the use of a new method has been described. The essence of a method consists in formation by selective polarization the piezoactive regions on the acoustic duct with a configuration of their borders which have the form of the bending around the given pulse characteristic of apparatus on SAW.

Keywords: the device on the surface acoustic waves, piezoceramic acoustic duct, selective polarization

ФОРМИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК УСТРОЙСТВ НА ПАВ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

Я. И. Лепих

Аннотация. Описаны принцип, конструктивные и технологические решения формирования основных характеристик устройств на поверхностных акустических волнах (ПАХ) с пьезоэлектрическим звукопроводом с использованием нового метода. Суть метода состоит в формировании путем селективной поляризации пьезоактивных участков на звукопроводе с конфигурацией их границ, которые имеют форму огибающей заданной импульсной характеристики устройства на ПАВ.

Ключевые слова: устройство на поверхностных акустических волнах, пьезокерамический

ВСТУП

Класичним методом формування електричних характеристик пристроїв на поверхневих акустичних хвилях (ПАХ) є метод, при якому на поверхні п'єзоелектричного звукопроводу з постійним по всьому об'єму вектором поляризації створюється система зустрічно-штирьових перетворювачів (ЗШП), з яких принаймні один є зваженим перекриттям електродів або іншим способом [1]. Технологічно, найчастіше, не вдається досить точно відтворити в топології ЗШП розрахункову функцію аподизації. Крім того, така структура ЗШП спричиняє появу ряду вторинних ефектів, що спотворюють характеристики пристроїв.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Існує пристрій на ПАХ [2], що складається з монокристалічного звукопроводу з кремнію, що не має п'єзоелектричного ефекту і з постійною діелектричною проникністю по всьому об'єму, на поверхні якого сформовані ділянки, що мають п'єзоелектричний ефект, а на них розміщені ЗШП для передачі і прийому поверхневої акустичної хвилі.

Однак такий пристрій має ряд істотних недоліків:

- низька ефективність перетворення електричного сигналу в акустичний і назад, унаслідок низького коефіцієнта електро механічного зв'язку п'єзоплівкових структур;
- складність конструкції, що містить велику кількість конструктивних елемен-

тів тонкоплівкового шаруватого виконання з різних за фізичними параметрами матеріалів: звукопровід із кремнію, металева плівка, п'єзоелектрична плівка з ZnO і знову металева плівка ЗШП;

- складність технології виготовлення такого пристрою внаслідок необхідності забезпечення високого ступеня орієнтації кристалітів п'єзоплівки, стехіометрії складу, доброї та стабільної в часі адгезії до підкладки і плівки до плівки;

- низька надійність конструкції, унаслідок великої кількості з'єднань елементів.

Використання в якості звукопроводу п'єзокераміки розширює можливості формування характеристик пристроїв на ПАХ.

У [3], наприклад, зважування ЗШП виконується шляхом формування в п'єзоелектричній пластині області з різним ступенем поляризації, що досягається тепловим впливом на звукопровід, що призводить до зміни величини коефіцієнта електромеханічного зв'язку в області розташування ЗШП. Однак такий спосіб має ряд очевидних недоліків, зокрема, складність розрахунку просторової конфігурації теплового поля, необхідного для реалізації заданої функції зважування ЗШП, а також технологічні складності, пов'язані з необхідністю точної локалізації теплового поля у теплопровідному матеріалі, що є надскладною задачею.

ОСНОВНА ЧАСТИНА

Нами запропоновано [4] метод формування характеристик пристроїв на ПАХ з неаподизованими ЗШП шляхом селективної поляризації п'єзокерамічного звукопроводу.

При цьому зважування ЗШП, що містить електроди однакової довжини, здійснюється створенням у керамічному звукопроводі ділянок, що мають п'єзоелектричні властивості з постійним у межах сформованої ділянки електрофізичними параметрами, зокрема коефіцієнтом електромеханічного зв'язку. При цьому конфігурації (границі) поляризованих ділянок мають форму огинаючої імпульсної характеристики перетворювача $h(t)$, отриманої від його заданої передатної характеристики $H_0(\omega)$ шляхом зворотного перетворення Фур'є

$$h(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} H_0(\omega) \exp(j\omega t) d\omega, \quad (1)$$

а неаподизований ЗШП розташований на цій ділянці. Другий неаподизований ЗШП розташовується на другій поляризованій ділянці звукопроводу, який може мати також топологію за формулою (1), або прямокутну.

Форма огинаючої розраховується на стадії проектування пристрою з використанням фізико-математичної моделі найбільш придатної для звукопроводів з сильних п'єзоелектриків, до яких відноситься п'єзокераміка. Такою може бути модель еквівалентних схем.

На першому етапі виготовлення наноситься на поверхні, робочу і протилежну, суцільна металічна плівка обмежена розрахованою огинаючою і здійснюється стандартний процес поляризації кераміки. Після цього на поляризовані ділянки п'єзокераміки методом тонкоплівкової технології наносяться неаподизовані з рівним перекриттям електродів зустрічно-штирьові перетворювачі. Цим досягається зменшення впливу на основні характеристики пристроїв на ПАХ дії ряду вторинних ефектів і досягаються більш точні параметри розрахункових характеристик.

Переваги такого методу формування характеристик пристроїв на ПАХ з п'єзокерамічним звукопроводом очевидні: зменшуються дії вторинних ефектів, що спотворюють характеристики пристроїв, обумовлені, зокрема, нерівномірністю металізації акустичного каналу, включається генерація і перевипромінювання сигналу частиною електродів ЗШП за межами активної (поляризованої) області, заданої границями поляризованої ділянки звукопроводу, забезпечується більш точна реалізація розрахункової функції зважування ЗШП і підвищується технологічність пристрою в цілому.

Запропонований метод успішно використано при розробці смугових фільтрів з робочими частотами в діапазоні від 5 до 30 МГц зі звукопроводами з п'єзокераміки системи цирконат-титанат свинцю (ЦТС).

В розробленому нами пристрої на ПАХ використовується керамічний звукопровід, що складається з ділянок, що мають

п'єзоелектричний ефект, які чергуються з ділянками, що не мають його, причому ЗШП розташовані безпосередньо на ділянках, що мають п'єзоелектричний ефект, а діелектрична проникність цих ділянок у два рази більша за діелектричну проникність ділянки, що не має п'єзо ефекту.

Така конструкція може бути реалізована в смугових фільтрах, дисперсійних і багатовідвідних лініях затримки тощо.

Пристрій на прикладі фільтра на ПАХ схематично представлено на рис. 1.

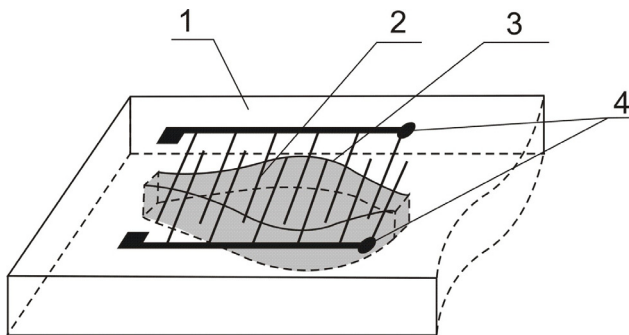


Рис. 1. Аподизація ЗШП методом селективної поляризації по огинаючій імпульсній характеристиці. 1 – звукопровід, 2 – поляризована п'єзокераміка, 3 – огинаюча функція аподизації, 4 – ЗШП.

На вхідний ЗШП 3, розташований безпосередньо на поляризованій ділянці 2 керамічного звукопроводу, подається електричний сигнал, який збуджує ПАХ, що поширюється в обидва боки від ЗШП. Досягаючи вихідного ЗШП, ПАХ перетворюється в електричний сигнал. Ефективність перетворення електричного сигналу в акустичний і назад обох ЗШП висока унаслідок високого значення коефіцієнта електромеханічного зв'язку k^2 , рівного для п'єзокераміки системи ЦТС близько 0,5. При цьому сигнал прямого наведення з одного ЗШП на другий, обумовлений ємнісним зв'язком між ними через матеріал звукопроводу, істотно менший унаслідок того, що діелектрична проникність звукопроводу на ділянці 4 між ЗШП у 2 рази менша, ніж в областях розташування ЗШП. Ємність між ЗШП у цьому випадку, виходячи з загальних міркувань, може бути записана з точністю до постійної співвідношенням

$$C = \frac{\varepsilon L}{d}, \quad (2)$$

де ε – відносна діелектрична проникність матеріалу звукопроводу на ділянці між ЗШП;

L – апертура ЗШП;

d – відстань між ЗШП.

Ефективність зниження величини сигналу прямого наведення з одного ЗШП на іншій дуже велика, що забезпечує одержання істотного поліпшення електричних характеристик, а конструкція пристрою, що містить звукопровід з кераміки і ЗШП на ньому гранично проста. Зменшення діелектричної проникності звукопроводу на ділянці між ЗШП дозволяє також збільшити верхню межу частотного діапазону використання п'єзокераміки, унаслідок шунтуючої ємності між ЗШП. Крім того, даний пристрій більш технологічний, тому що не вимагає нанесення п'єзоплівки з високоорієнтованими кристалами і великою кількістю технологічних операцій для створення багат шарової структури, має меншу трудомісткість і вартість, унаслідок цього, а також унаслідок більш низької вартості керамічного звукопроводу.

Перевагами такого конструктивного рішення в порівнянні з відомими особливо помітні при використанні його в багатовідвідних лініях затримки, де є велика кількість ЗШП, між якими існує ємнісний зв'язок понижений у даному випадку меншим значенням ε неполяризованих ділянок кераміки.

В даний час пристрої на ПАХ з п'єзокерамічним звукопроводом можуть використовуватися в радіоелектронній апаратурі, у тому числі в радіоприймальній, як фільтри преселекції, елементів гетеродинів, змішувачів, фільтрів проміжної частоти, детекторів тощо. Основним блоком, що визначає якісні показники радіоприймача є підсилювач проміжної частоти (ПЧ). До цих показників відноситься чутливість, вибірковість по сусідньому каналу, смуга відтворених частот, нелінійні перекручування тощо. Усі вони визначаються в основному фільтром ПЧ.

У порівнянні з розроблюваними ПАХ фільтрами з використанням у якості звукопроводу монокристала пропонований фільтр із керамічним звукопроводом окрім того має на порядок меншу вартість.

ВИСНОВКИ

Запропонований і досліджений метод формування основних характеристик пристроїв на ПАХ з п'єзокерамічним звукопроводом шляхом селективної поляризації ділянок з розташуванням на них неаподизованих ЗШП є досить ефективний і забезпечує суттєве зниження впливу вторинних ефектів на основні характеристики.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1]. D. Morhan. *Ustroystva obrabotky syhnalov na poverkhnostnikh akustycheskykh volnakh*. Per. s anhl pod red. S. Y. Baskakova. -M.:Radyo y svyaz,1990.-416 s.
- [2]. Patent SShA № 382 8283, kl 333-30, USA.
- [3]. Zayavka Yaponyy № 57-3246, MKY NO3N 9/64.
- [4]. Ya. I. Lepikh A.s. № 1545916. Opubl. 22.10.89.

Стаття надійшла до редакції 04.09.2017 р.

UDC 531:535 PACS 0707 Df, 02070 Dh
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111407>

FORMATION OF THE DEVICES ON THE SAW CHARACTERISTICS BY A METHOD OF SELECTIVE POLARIZATION

Ya. I. Lepikh

Interdepartmental scientific-educational physics and technical centre of MES and NAS of Ukraine at the Odessa I. I. Mechnikov National University, 2, Dvoryanska atr., 65082, Odessa, Ukraine, e-mail: ndl_lepikh@onu.edu.ua

Summary

The principle, constructive and technological decisions of the formation of the device on surface acoustic waves (SAW) with piezoelectric acoustic duct basic characteristics with the use of a new method has been described. The essence of a method consists in formation by selective polarization the piezoelectric regions on the acoustic duct with a configuration of their borders which have the form of the envelope curve of the given pulse characteristic of the device on the SAW. The form of the envelope curve is calculated on a device design stage with the use of physical and mathematical model by the most suitable for acoustic duct from strong piezoelectric materials to which piezoceramics concerns. The model of the equivalent circuits can be such.

At the first fabrication stage on the working and opposite surfaces, the continuous metallic film limited by calculated envelope curve is putted and the standard ceramics polarization process is carried out. After that on the polarized piezoceramic regions by a method of thin-film technology nananodized interdigital converters (IC) with equal electrode overlapping are putting. It gives the reduction of the influence on the devices on SAW basic characteristics the action of some secondary effects and more exact parameters of calculated characteristics are achieved.

In particular, owing to uniformity of metallization of the acoustic duct working surface by the IC electrodes of equal overlapping the essential decrease of the signal diffraction losses, and the non-polarized part of ceramics which is between entering and exit IC has essentially smaller value of dielectric permeability and by that essentially decreases a signal of direct passage from an input of the

device on an exit, and that in turn allows to reduce the distortion of the device basic characteristics.

It is necessary to notice, that the method of selective polarization gives a principle opportunity to use effect of the signal transformation by polarization of acoustic duct with mutually perpendicular vectors of polarization on the regions of accommodation of entering and exit IC.

Keywords: the device on the surface acoustic waves, piezoceramic acoustic duct, selective polarization

УДК 531:535 PACS 0707 Df, 02070 Dh

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111407>

ФОРМУВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ПРИСТРОЇВ НА ПАХ МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОЇ ПОЛЯРИЗАЦІЇ

Я. І. Лепіх

Міжвідомчий науково-навчальний фізико-технічний центр МОН і НАН України при
Одеському національному університеті імені І. І. Мечникова,
вул. Дворянська, 2, 65082, Одеса, Україна, e-mail: ndl_lepikh@onu.edu.ua

Реферат

Описані принцип, конструктивні і технологічні рішення формування основних характеристик пристроїв на поверхневих акустичних хвилях (ПАХ) з п'єзоелектричним звукопроводом з використанням нового методу. Суть методу полягає у формуванні шляхом селективної поляризації п'єзоактивних ділянок на звукопроводі з конфігурацією їхніх границь, що мають форму огинаючої заданої імпульсної характеристики пристрою на ПАХ. Форма огинаючої розраховується на стадії проектування пристрою з використанням фізико-математичної моделі найбільш придатної для звукопроводів з сильних п'єзоелектриків, до яких відноситься п'єзокераміка. Такою може бути модель еквівалентних схем.

На першому етапі виготовлення наноситься на поверхні, робочу і протилежну, суцільна металічна плівка обмежена розрахованою огинаючою і здійснюється стандартний процес поляризації кераміки. Після цього на поляризовані ділянки п'єзокераміки методом тонкоплівкової технології наносяться неаподизовані з рівним перекриттям електродів зустрічно-штирьові перетворювачі (ЗШП). Цим досягається зменшення впливу на основні характеристики пристроїв на ПАХ дія ряду вторинних ефектів і досягаються більш точні параметри розрахункових характеристик.

Зокрема, внаслідок рівномірності металізації робочої поверхні звукопровода електродами ЗШП рівного перекриття суттєво зменшуються дифракційні втрати сигналу, а неполяризована частина кераміки, що знаходиться між вхідним і вихідним ЗШП, має суттєво менше значення діелектричної проникності і тим самим суттєво зменшується сигнал прямого проходження з входу пристрою на вихід, і що в свою чергу дозволяє зменшити спотворення основних характеристик пристроїв.

Слід зауважити, що метод селективної поляризації дає принципову можливість використати ефект трансформації сигналу шляхом поляризації звукопроводу з взаємно перпендикулярними векторами поляризації на ділянках розміщення вхідного і вихідного ЗШП.

Ключові слова: пристрій на поверхневих акустичних хвилях, п'єзокерамічний звукопровід, селективна поляризація

МАТЕРІАЛИ ДЛЯ СЕНСОРІВ

SENSOR MATERIAL

УДК 538.971

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.105564>

ТЕХНОЛОГІЧНІ АСПЕКТИ ОТРИМАННЯ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОГО РbTe

*І. В. Горічок¹, І. М. Ліщинський¹, С. І. Мудрий², О. С. Оберемок³, Т. О. Семко¹, І. М. Хацевич³,
О. М. Матківський¹, Г. Д. Матеїк⁴, Р. О. Дзумедзей¹*

¹ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»,
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76018, Україна; e-mail: HorigochokIhor@gmail.com;

²Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, Львів, 79005, Україна;

³Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАНУ,
Проспект науки, 41, Київ, 03028, Україна;

⁴Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу,
вул. Карпатська, 15, Івано-Франківськ, 76018, Україна

ТЕХНОЛОГІЧНІ АСПЕКТИ ОТРИМАННЯ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОГО РbTe

*І. В. Горічок, І. М. Ліщинський, С. І. Мудрий, О. С. Оберемок, Т. О. Семко, І. М. Хацевич,
О. М. Матківський, Г. Д. Матеїк, Р. О. Дзумедзей*

Анотація. Представлено результати дослідження фазового складу і структурного стану синтезованих за різних технологічних факторів полікристалічних зливків бездомішкового телуриду свинцю та виготовлених на їх основі методом пресування порошку зразків. Проведено вимірювання температурних залежностей питомої електропровідності, коефіцієнта термо-ЕРС та коефіцієнта теплопровідності. Встановлено вплив температури відпалу зразків на їх термоелектричні властивості.

Ключові слова: телурид свинцю, синтез, пресування, термоелектричні властивості

TECHNOLOGICAL ASPECTS OBTAINING OF THE THERMOELECTRIC PbTe

*I. V. Horichok, I. M. Lischynskyy, S. I. Mudryy, A. S. Oberemok, T. O. Semko, I. M. Hatsevych,
O. M. Matkivskyy, G. D. Mateyik, R. O. Dzumedzey*

Abstract. The results of the research of phase composition and structural state of synthesized by various technological factors polycrystalline ingots of undoped lead telluride and made based on them samples by pressing the powder. Measurement of the temperature dependences of conductivity, Seebeck coefficient and thermal conductivity are made. The influences of annealing temperature of samples at their thermoelectric properties are researched.

Keywords: lead telluride, synthesis, pressing, thermoelectric properties

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПОЛУЧЕНИЯ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО PbTe

*И. В. Горичок, И. М. Лищинський, С. И. Мудрый, А. С. Оберемок, Т. А. Семко, И. М. Хацевич,
А. Н. Маткивський, Д. Матейк, Р. А. Дзумедзей*

Аннотация. Представлены результаты исследования фазового состава и структурного состояния синтезированных при различных технологических факторах поликристаллических слитков беспримесного теллурида свинца и изготовленных на их основе методом прессования порошка образцов. Проведено измерение температурных зависимостей удельной электропроводности, коэффициента термо-ЭДС и коэффициента теплопроводности. Установлено влияние температуры отжига образцов на их термоэлектрические свойства.

Ключевые слова: теллурид свинца, синтез, прессование, термоэлектрические свойства

1. ВСТУП

Телурид свинцю – напівпровідниковий матеріал, який використовується для створення на його основі термоелектричних перетворювачів середнього діапазону температур (200-500)°С. В останні роки, з екологічних міркувань, спостерігається тенденція до вивчення безсвинцевих термоелектричних матеріалів [1-3]. Проте, їх властивості, трудомісткість методів отримання і, що не менш важливо з практичної точки зору, собівартість, дають підстави вважати, що у короткостроковій перспективі широкого практичного використання таких сполук не очікується. З огляду на це актуальними залишаються дослідження телуриду свинцю, з метою оптимізації технології його отримання

та покращення основних експлуатаційних характеристик.

Незважаючи на значну кількість публікацій в сучасній науковій періодиці присвячену термоелектриці, відносно небагато уваги в сучасних роботах приділяється технологічним аспектам отримання термоелектричних зразків, особливо отриманих методом пресування порошків [4-7]. Варто зазначити, що з практичної точки зору, використання методу пресування порошків є більш ефективним у порівнянні з іншими способами, оскільки можна отримувати зразки потрібної форми з високими механічними властивостями. Термоелектричні параметри при цьому не суттєво відрізняються від властивостей монокристалічних зразків [8].

В даній роботі зроблено акцент на дослідженні впливу технологічних факторів синтезу полікристалічних зливків на їх фазовий склад, структурний стан, а також на термоелектричні властивості зразків отриманих методом холодного пресування.

2. МЕТОДИКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

Синтез матеріалів проводили у вакуумованих до залишкового тиску 10^{-4} Па кварцових ампулах. При цьому використовували свинець з вмістом основного компоненту 99,99% та телур – 99,999%. Ампули розташовувались у печі горизонтально. Для уникнення різкого збільшення тиску пари телуру у ампулі та створення умов для якнайкращого перемішування розплавлених компонентів, синтез здійснювався у кілька етапів: нагрівання до 500 °С (17 °С/хв), витримка 1 год; нагрівання до 700 °С (7 °С/хв), витримка 3 год; нагрівання до 1020 °С (11 °С/хв), витримка 1 год; охолодження до 900 °С (4 °С/хв); гартування на повітрі. Отримані зливки, довжиною < 10 см, та поперечним розміром < 1.5 см, подрібнювали у агатовій ступці та, виділивши фракції розміру (0,05 - 0,5) мм, пресували під тиском 2,0 ГПа. Отримані циліндричної форми зразки з $d = (5-8)$ мм та $h \approx (5-8)$ мм піддавали відпалу у вакуумі чи на повітрі.

Фазовий склад і структуру синтезованих зливків та зразків досліджували X-дифракційними методами на автоматичному дифрактометрі STOE STADI P (виробник фірма „STOE & Cie GmbH”, Німеччина). Обробку експериментальних дифракційних масивів проводили за допомогою пакету програм STOE WinXPOW (версія 3.03) та PowderCell (версія 2.4).

Елементний склад та розподіл домішок по глибині зразків досліджували методом вторинної іонної мас-спектрометрії (ВІМС). Для вимірів було використано іонно-мікрондодовий мас-спектрометр IMS 4F (виробник фірма “Самеса”, Франція). Розпилення поверхні зразків первинним іонним пучком проводилося в режимі прямокутного растра 200 мкм × 200 мкм під кутом падіння - 45°. Енергія та струм пучка первинних іонів

O_2^+ складала 12.5 кеВ та 0.4 мкА, відповідно. Детектування вторинних іонів відбувалося з площі діаметром 60 мкм в центрі растра, що дозволяло позбутися ефекту кратера.

Дослідження морфології поверхні та вимірювання мікротвердості зразків проводили з використанням твердоміра NEXUS 412A. Додатково мікроструктура зразків вивчалась з використанням скануючого електронного мікроскопа в поєднанні з енергодисперсійним рентгенівським аналізом (приставка ESEM FEI Quanta 200 FEGi, прискорююча напруга 15 кВ).

Вимірювання сталої Холла проводили у постійних магнітних та електричних полях чотиризондовим методом. Струм через зразки складав $\approx 100-500$ мА. Магнітне поле було напрямлене перпендикулярно до повздовжньої осі циліндричного зразка за індукції 1,5 Тл.

Величину термо-ЕРС α і питому електропровідність σ визначали за стандартною методикою на установці схема якої наведена на рис.1. Зразок затискали між двома мідними стержнями поміщеними у піч U_1 , що нагріває його до заданої температури вимірювання. На один з мідних стержнів намотано піч U_2 для створення градієнту температури ($\approx 5^\circ\text{C}$) на зразку. Вимірювання температури проводили двома ХА-термопарами поміщеними в отвори, висвердлені у зразку. Електропровідність визначали вимірюючи спад змінної напруги, яка генерувалась джерелом U_3 на досліджуваному зразку. При цьому, одна з віток кожної термопари використовувалась як струмопідвід. Коефіцієнт термо-ЕРС та питома електропровідність визначались згідно формул:

$$\alpha = \frac{U_{\text{ерс}}}{(T_2 - T_1)}, \quad \sigma = \frac{U_{\text{ет}} \cdot l}{U_{\text{зр}} \cdot R_{\text{ет}} \cdot S}.$$

Тут $U_{\text{зр}}$ – спад напруги на зразку при проходженні змінного струму, $R_{\text{ет}}$ – опір еталонного резистора, $U_{\text{ет}}$ – спад напруги на еталонному резисторі, S – площа поперечного перерізу зразка, l – відстань між термопарами, $U_{\text{ерс}}$ – величина термо-ЕРС, T_1, T_2 – температури холодного та гарячого кінців зразка.

Теплопровідність зразків визначали методом радіального теплового потоку (рис. 2).

Для реалізації даного методу уздовж осі циліндричного зразка поміщається нагрівач, що створює градієнт температури в радіальному напрямку. Останній вимірюється двома термопарами, розташованими вздовж радіуса. Коefіцієнт теплопровідності k обчислюється за формулою:

$$k = q \ln \left(\frac{r_1}{r_2} \right) \frac{1}{2\pi(T_1 - T_2)},$$

де q – електрична потужність на одиницю довжини нагрівача, T_1 і T_2 – температури зразка на відстані r_1 та r_2 від осі.

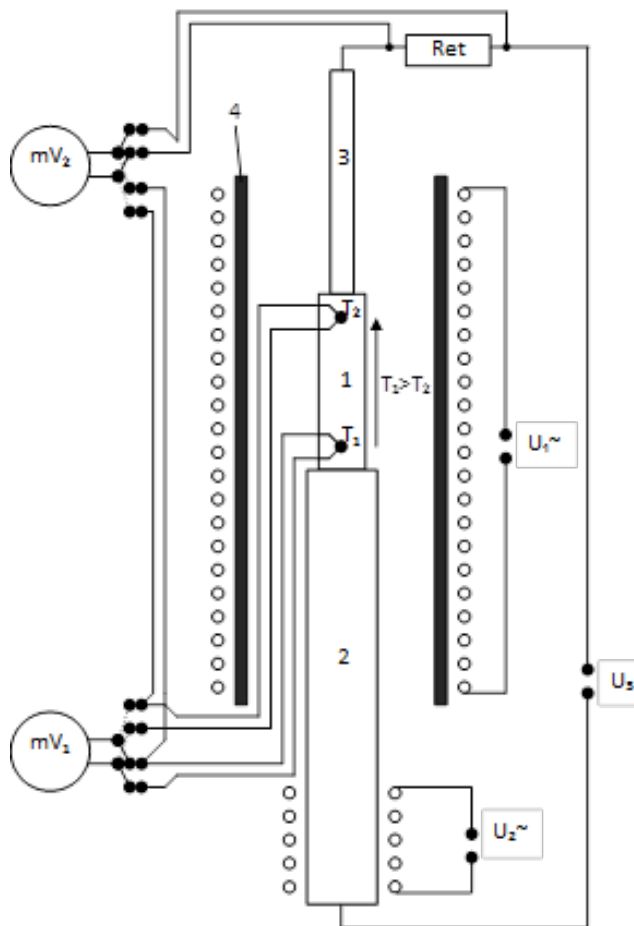


Рис. 1. Схема вимірювання коефіцієнта термоЕРС та питомої електропровідності: 1 – зразок; 2, 3 – мідні стержні; 4 – кварцова трубка.

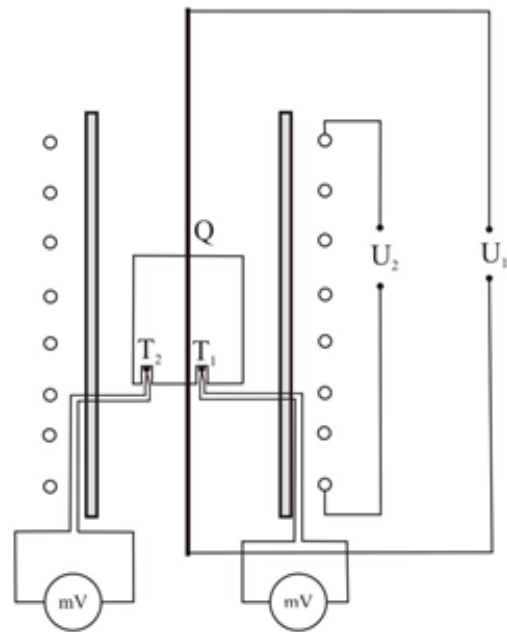


Рис. 2. Схема вимірювання теплопровідності методом радіального теплового потоку: Q – нагрівник; T_1 і T_2 – температури зразка на відстані r_1 та r_2 від осі.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ЕКСПЕРИМЕНТУ ТА ЇХ АНАЛІЗ

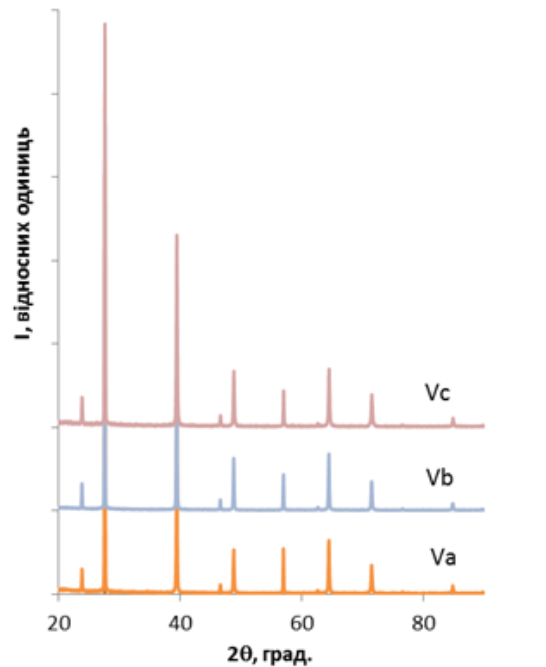
Синтезовані за описаною вище методикою зливки характеризувались однорідною поверхнею без видимих макродефектів. Для встановлення впливу технологічних факторів на структурний стан і фазовий склад досліджуваних матеріалів рентгенівські дифрактометричні дослідження проводили окремо для синтезованих зливок (подрібнених безпосередньо перед проведенням вимірювань), порошку розмеленого за 10 днів до проведення аналізу та пресованих зразків, які, як і зливки, подрібнювали безпосередньо перед вимірюваннями. Отримані дифрактограми представлено на рис. 3.а.

Усі досліджувані матеріали однофазні, структурного типу NaCl. При співставленні отриманих дифрактограм з теоретичною спостерігається відносно посилення інтенсивностей лінії дифракційного відбивання у напрямку (100), що свідчить про наявність текстури зразків. Її поява зумовлена напрямленим ростом кристалітів (рис. 4) за вибраних технологічних умов синтезу.

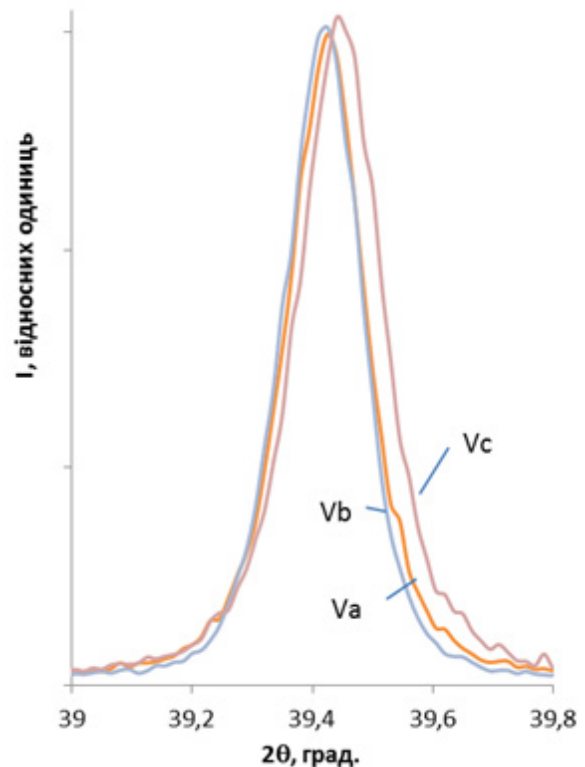
Параметри елементарних комірок для зливків, тобто свіжо розмеленого матеріалу, і витриманого порошку в межах похибки однакові ($a_{\text{зл}} = 6,4577 \pm 0,0010 \text{ \AA}$, $a_{\text{пор.}} = 6,4580 \pm 0,0010 \text{ \AA}$). Для пресованого і відпаленого зразка спостерігається зменшення параметра елементарної комірки ($a_{\text{зр}} = 6,4564 \pm 0,0010 \text{ \AA}$) та деяка зміна структури рефлексів (рис. 3.б), у порівнянні з порошком. Деякий зсув вбік більших кутів може бути зумовлений наведенням при пресуванні напруг, що, з огляду на великі тиски, є закономірним. Розширення піків може бути зумовлене як наявністю мікронапруг так і зміною, а саме зменшенням, розмірів областей когерентного розсіювання. Оцінка за формулою Дебая-Шерера даних розмірів визначена на основі рефлексу (200) становить 158 нм ($K = 0,9$) для зразка Va та 128 нм ($K = 0,9$) для зразка Vc. Можна припустити, що в процесі пресування частково руйнується орієнтаційна напрямленість зерен шляхом зколювання, що зокрема, призводить і до зменшення ОКР. Дане припущення частково підтверджується і зміною у співвідношеннях інтенсивностей дифракційних піків $I(200)/I(220)$. Так для зразка Va ця величина становить $\approx 2,5$, зразка Vc – $\approx 2,1$, а для теоретичної дифрактограми «ідеального кристалу» – $\approx 1,5$. Тобто пресування призводить до зменшення текстури.

Варто зазначити, що практична рівність параметрів елементарних комірок свіжорозмеленого зливку та витриманого порошку що свідчить про те, що напруги, наведені при розмелюванні, в процесі витримки не знімаються.

Характерною ознакою досліджуваних зразків є їх висока густина та, відповідно, низька поруватість (рис.5). Для зразків пресованих під тиском 2 ГПа та відпалених при 230 °С, в залежності від інших технологічних умов, величина ρ , визначена методом гідростатичного зважування (методом Архімеда), становить $\rho_A = (8,15-8,20) \text{ г/см}^3$. При параметрі елементарної комірки $a = 6,456 \text{ \AA}$ рентгенівська густина становитиме $\rho_p = 8,268 \text{ г/см}^3$. Таким чином, відносна густина пресованих зразків становить не менше 98,57 %.

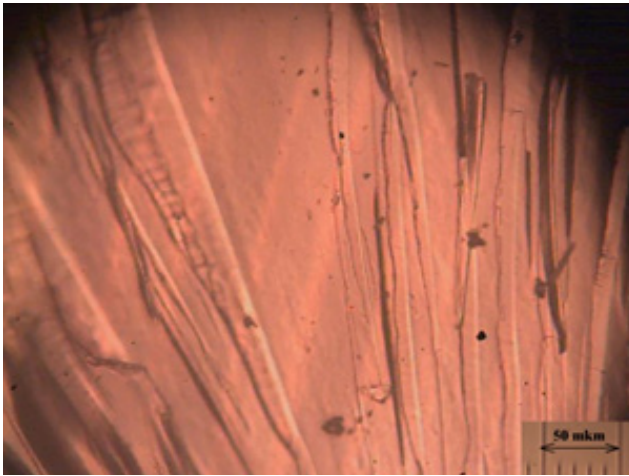


а)



б)

Рис. 3. Дифрактограми зразків $\text{Pb}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ (Va – зливок, Vb – порошок, Vc – пресований зразок) (а) та співставлення структури рефлексів (220) для них (б) (тиск пресування 2 ГПа).



а)

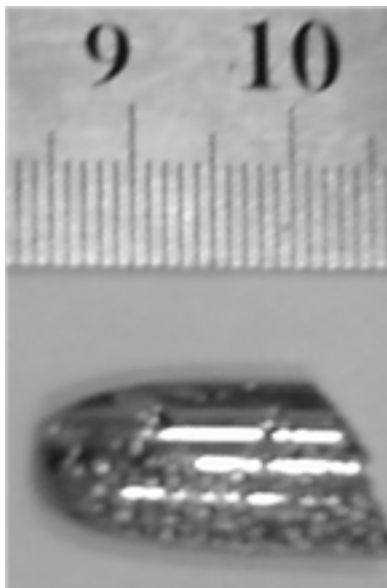
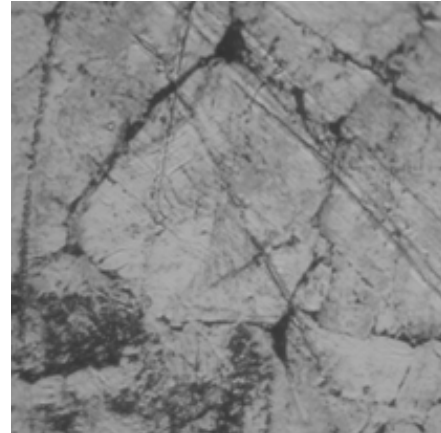


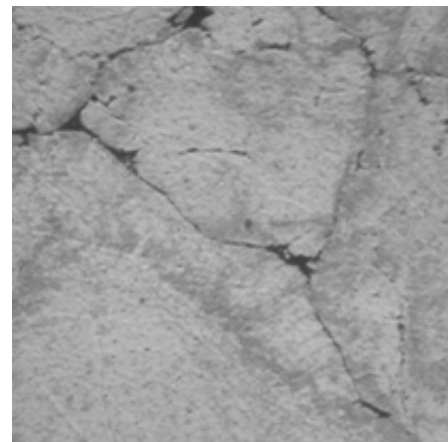
Рис. 4. Мікроструктура сколу синтезованого зливку (перпендикулярно до повздовжньої осі) (а) та частина зливку телуриду свинцю (б).

Варто зазначити, що відносно високі тиски пресування забезпечують також отримання однорідного по висоті зразка навіть при відносно несприятливих відношеннях висоти зразка до його радіусу. Згідно [9], при відносно невисоких тисках (десятки МПа) та відношенні $h/r \approx 1$, нерівномірність розподілу тисків може досягати до 50 %, що призведе і до аналогічних неоднорідностей як густини зразка, так і його властивостей. Так при тиску пресування 0,6 ГПа мікротвердість невідпаленого зразка $Pb_{1-x}Sb_xTe_{0,5}$ (фракції (0-0,5) мм) з боку пуансона на 20 відсотків вища ніж з протилежного. При

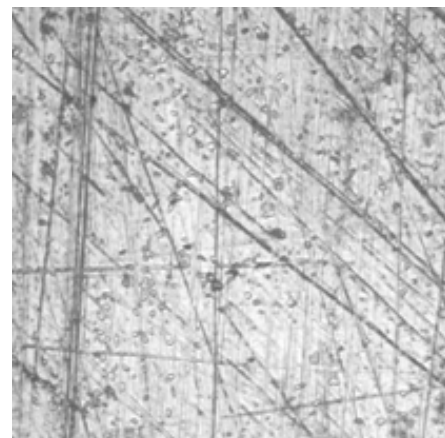
тиску 1,5 ГПа відповідні значення становлять 505.6 МПа та 514.4 МПа, що не перевищує похибки вимірювання.



а)



б)



в)

Рис. 5. Структура поверхні зразків (збільшення 400x) отриманих при тиску пресування 2,0 ГПа: не відпалених (а) і відпалених при температурі 230 °С (б) та 500 °С (в).

Відпалені при 230 °С зразки бездомішкового PbTe характеризуються нижчою твердістю ($H_V \approx 350$ МПа) у порівнянні з невідпаленими ($H_V \approx 510$ МПа). Подальше збільшення температури відпалу до 500 °С не змінює величини мікротвердості.

Висока щільність та відсутність значної поруватості пресованих зразків найімовірніше є причиною того, що відпал на повітрі не призводить до значного окиснення всього об'єму зразка, при якому спостерігалась би деградація термоелектричних властивостей. Натомість, досліджувані зразки без застосування додаткового захисту характеризувались часовою стабільністю термоелектричних властивостей на повітрі на протязі не менше трьох тижнів (в умовах проведення експерименту, тобто періодичних нагрівань-охолоджень), що дозволяло проводити практично весь комплекс досліджень. Концентрація кисню, згідно результатів дослідження методом ВІМС, суттєвою є лише на поверхні (рис. 6). Тобто, можна стверджувати, що основні процеси на які впливає відпал і які стабілізують властивості зразка, протікають в його об'ємі. Даний висновок підтверджується дослідженням термоелектричних властивостей зразків, відпалених у вакуумі за аналогічної температури, і властивості яких в межах похибки вимірювань не відрізнялись від властивостей відпалених на повітрі зразків.

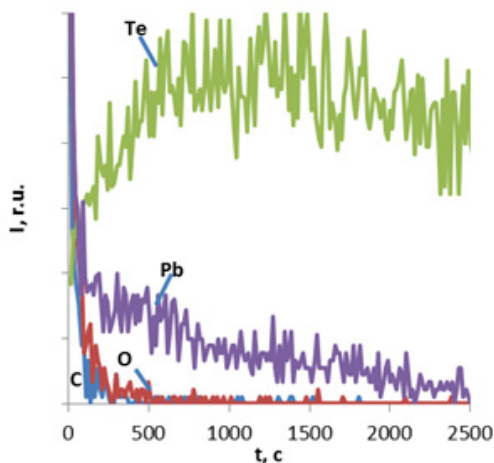


Рис. 6. Залежності інтенсивностей ліній карбону, оксигену, телуру та свинцю у спектрах ВІМС від часу травлення для зразків PbTe відпалених при температурі 230 °С на повітрі.

На основі дослідження ефекту Холла при кімнатних температурах, встановлено, що у досліджуваних зразках холлівська концентрація носіїв становить $(0,8-1,2) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, а рухливість $(110-130) \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$. Відносно невисокі значення концентрації носіїв свідчать про несуттєве порушення стехіометрії зразків в процесі проведення технологічних операцій їх отримання.

Типові температурні залежності термоелектричних параметрів нелегованого телуриду свинцю представлено на рис. 7. Властивості невідпалених зразків та відпалених при $T = 230$ °С практично не відрізняються. При температурах нижче 200 °С зразки виявляють дірковий тип провідності. Коефіцієнт термоЕРС при 100 °С становить ≈ 400 мкВ/К. З ростом температури в околі 200 °С тип провідності змінюється на електронний і при 300 °С $\alpha \approx 250$ мкВ/К. Температурна залежність електропровідності для всіх зразків є немонотонною з мінімумом при температурі, що відповідає р-п-переходу. Коефіцієнт теплопровідності у досліджуваному діапазоні температур практично не змінюється зі зміною температури і становить $\approx (0,004-0,006) \text{ Вт}/(\text{см} \cdot \text{К})$.

Відпал при 500 °С призводить до значного підвищення електропровідності матеріалу, який в досліджуваному діапазоні температур проявляє лише р-тип провідності. Теплопровідність матеріалу при цьому суттєво не змінюється.

Причиною якісних змін електропровідності матеріалу може бути як реструктуризація міжзеренних меж, зафіксована при дослідженні структури поверхні зразків, так і модифікація його дефектної підсистеми. Проте, згідно [10-11], дефектна підсистема PbTe практично повністю гартується при значно вищих за 500 °С температурах. Таким чином саме зменшення опору між зернами, з яких пресований зразок, є основною причиною росту величини σ .

Подовження часових режимів синтезу не призводить до покращення однорідності зливків. Для підтвердження чи спростування цього висновку проведено синтез зливків з максимально можливими витримками на різних режимах синтезу зливків, що, як очікувалось, повинно б призвести до отримання зразків з високим ступенем стехіометричності.

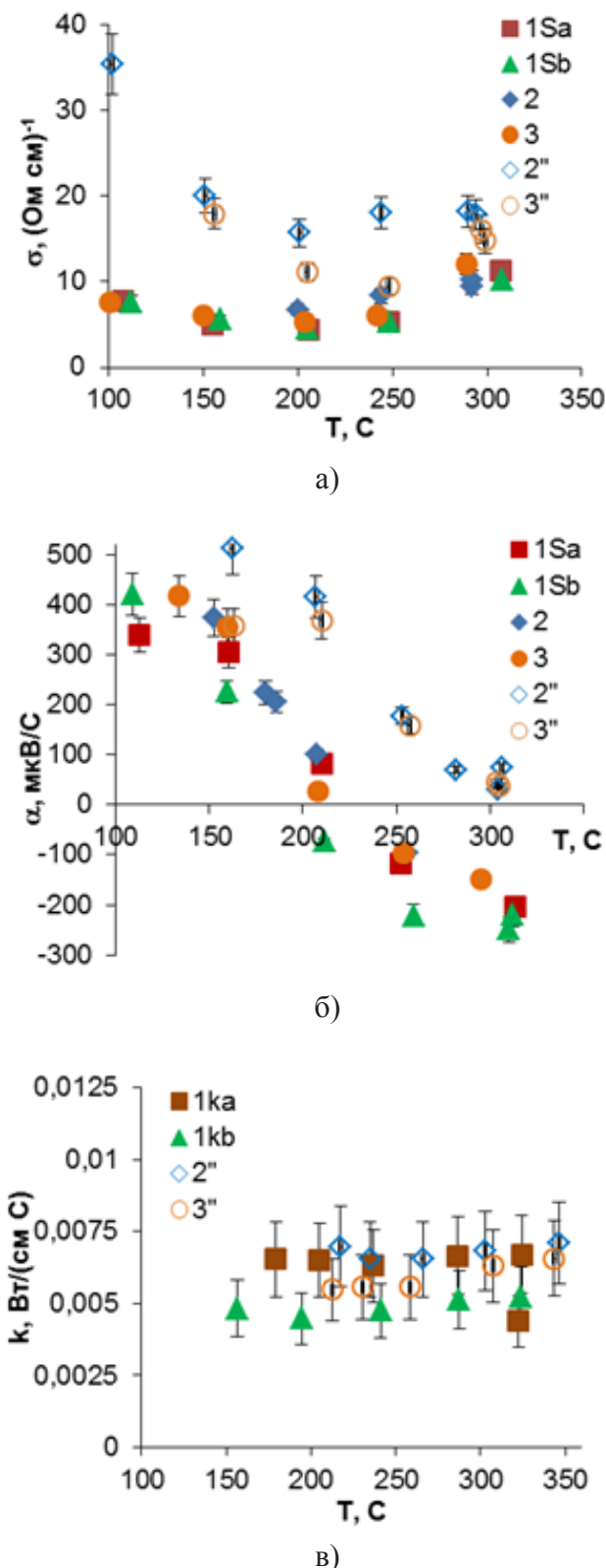


Рис. 7. Температурні залежності питомої електропровідності σ (а), коефіцієнта термоЕРС α (б) та коефіцієнта теплопровідності k (в) зразків PbTe (XV) отриманих методом пресування порошку (0,05-0,5) мм під тиском 2 ГПа. Зразки 1Sa, 1Sb – відпалені при 230 °С, 2, 3 – не відпалені, 2'', 3'' – відпалені при 500 °С.

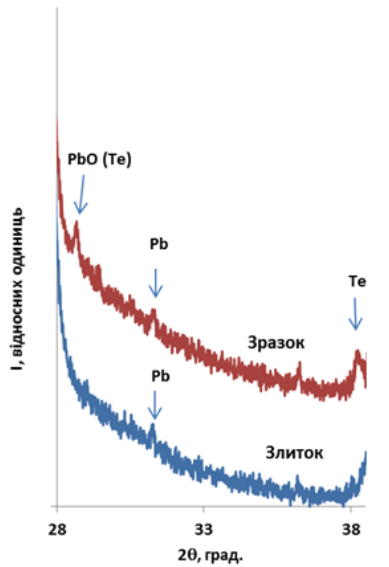
Синтез проходив у кілька етапів. Спочатку в печах встановлювалась температура 500 °С, за якої всі компоненти переходили у рідку фазу. Для підвищення гомогенності сполуки при цій температурі виконувалось перемішування розплаву, шляхом погойдкування печі на кути $\pm 30^\circ$. Після цього електропіч витримувалась впродовж 50 год при сталій температурі для дифузії речовин. Потім в печі встановлювалась температура 970 °С і знову виконувалось перемішування розплаву. Після цього піч встановлювалась горизонтально і в такому стані процес синтезу тривав 70 год. Охолодження електропечі проводилось до температури 450 °С з швидкістю 5 °С К/год, а надалі – з двічі більшою швидкістю до кімнатної температури.

За вибраних умов синтезу, згідно з результатами рентгенівського дифрактометричного аналізу, зливок виявився двофазним. Основна фаза – PbTe, а в області кутів $2\theta \approx 31^\circ$ зафіксовано пік, що відповідає фазі чистого свинцю Pb (рис.8).

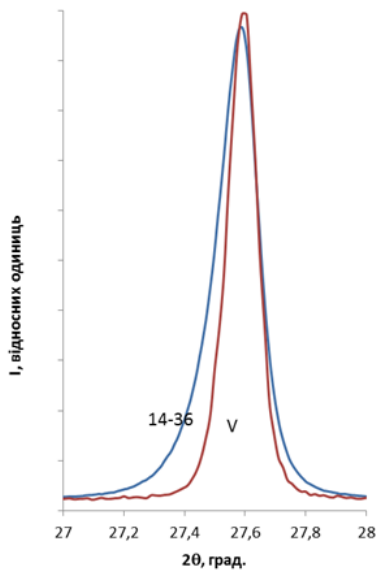
При дослідженні поверхні зливку скануючим електронним мікроскопом підтверджено наявність включень додаткових фаз (рис. 9). Зважаючи на особливості Т-Х діаграми в області гомогенності PbTe, кристалізація на початкових стадіях може відбуватися з отримання матеріалу з надстехіометричним халькогеном, що в результаті, і є найімовірнішою причиною наявності включень металу. При швидкому охолодженні (зливки V) даний ефект відсутній через малий час, протягом якого може відбуватися дифузія компонентів для їх кластеризації. При температурах ≤ 500 °С область гомогенності PbTe не є такою асиметричною, як в околі температури плавлення, а тому ніяких кластероутворюючих процесів не відбувається.

На основі структурних та фазових дослідження пресованих і відпалених зразків виготовлених з цього ж зливку встановлено наявність у них окрім фази свинцю також включення фази чистого телуру (рис. 8). Найімовірніше, надстехіометричний розчинений за високої температури в матриці телур при відпалі зразків за температури, при якій його розчинність значно нижча, випадає в окрему фазу.

Важливо зазначити, що на дифрактограмах пресованого і відпаленого зразка закономірно з'являються також піки від фази оксиду свинцю. Проте рефлекс даної фази в області $2\theta = 28,5^\circ$ практично співпадає з рефлексом фази телуру структурного типу As (в області $2\theta = 38^\circ$ фіксується фаза телуру структурного типу Se), що ускладнює їх ідентифікацію та розділення.

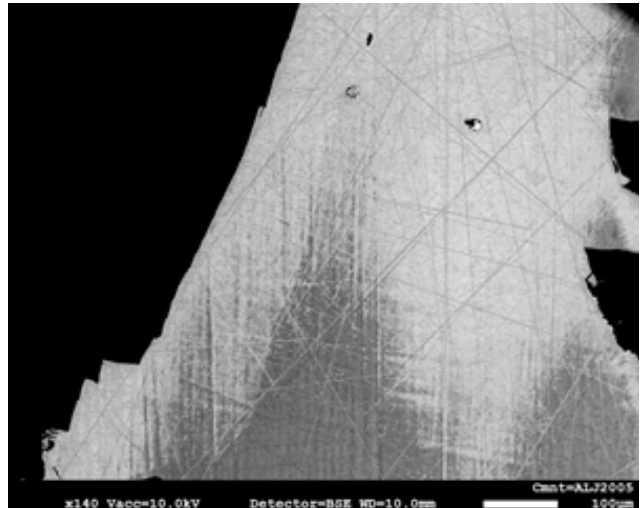


а)

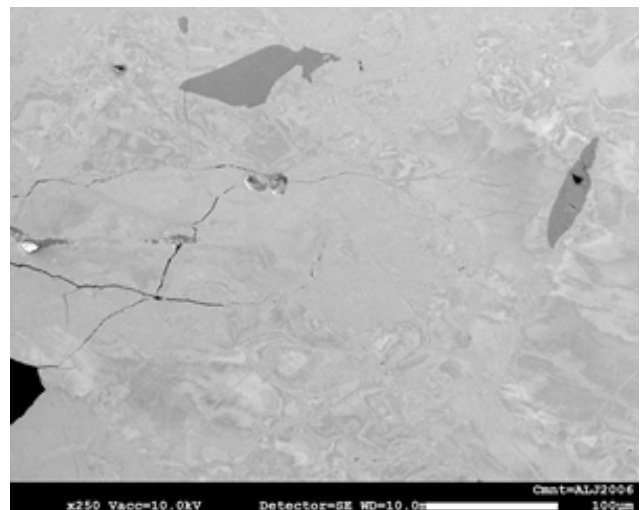


б)

Рис. 8. Фрагмент дифрактограми зливка 14-36 та виготовленого з нього зразка (14-36 SG) з відзначеними рефlekсами від додаткових фаз (а); структура рефлексів (200) для зливків V і 14-36 (б).



а)



б)

Рис. 9. SEM - зображення поверхні зливка PbTe 14-36 (а) та пресованого зразка (б) на яких фіксується наявність включень додаткових фаз.

З порівняння структури рефлексів зливків 14-36 та Vа (рис. 3.9 б), видно що для першого з них лінії є ширшими, що вказує на менші області когерентного розсіювання або наявність значних мікронапруг. Ця закономірність проявляється як при співставленні дифрактограм зливків, так і пресованих зразків. Якщо припустити, що розширення зумовлене лише зміною розмірів областей когерентного розсіювання, то для зливка 14-36 величина D , визначена за найінтенсивнішим рефлексом (200) становить 102 нм ($K = 0,9$), що значно менше ніж для зразків V. У випадку якщо у

розширення значним є внесок мікронапруг, то відкритим залишається запитання, чому за більш рівноважних умов величина ϵ є більшою ніж для гартованих зливків?

4. ВИСНОВКИ

Для отримання однофазних структурно однорідних полікристалічних зливків гартування на повітрі є більш прийнятним ніж повільне охолодження.

Відпал холодно пресованих зразків призводить до їх ущільнення, а при $T_{\text{відпалу}} = 500^\circ\text{C}$ відбувається реструктуризація міжкристалічних меж, що забезпечує значне підвищення питомої електропровідності.

Отриманням термоелементів методом пресування порошку під тиском 2 ГПа забезпечується отримання зразків з високою однорідністю вздовж осі пресування та низькою пористістю що є причиною непроникності кисню вглиб зразка та створює умови для термічної обробки на повітрі без деградації його властивостей.

Автори вдячні Сільвії Костман і Петрі Шеппан з Інституту хімічної фізики твердих матеріалів Макса Планка в м. Дрезден за проведення металографічних і СЕМ досліджень.

Список використаної літератури

[1]. L.-D. Zhao, V. P. Dravid, and M. G. Kanatzidis. The panoramic approach to high performance thermoelectrics // *Energy Environ. Sci.*, 7, pp. 251–268 (2014).

[2]. J. R. Sootsman, D. Y. Chung, and M. G. Kanatzidis. New and Old Concepts in Thermoelectric Materials // *Angew. Chem. Int. Ed.*, 48, pp. 8616 – 8639 (2009).

[3]. A. V. Shevelkov. Chemical aspects of the

design of thermoelectric materials // *Russian Chemical Reviews* 77 (1) 1-19 (2008).

[4]. E. P. Sabo. Tehnologija hal'kogenidnyh termoelementov. Fizicheskie osnovy. // *Termoelektrichestvo.*, 3, pp. 30-46 (2000). (takozh div. vsi nastupni nomery do 2006) (*in Russian*).

[5]. D. M. Freik. Vplyv tekhnolohiy vyhotovlennya na termoelektrychni vlastyvoli nestekhiometrychnoho i lehovanoho plyumbum telurydu ta tverdikh rozchyniv na yoho osnovi // *Termoelektryka.*, 2, pp. 43-50 (2011) (*in Ukrainian*).

[6]. D. Freik, R. Ahiska, I. Gorichok, L. Nykyruy, N. Dykun, K. Aktas, S. Acar and G. Ahiska. Synthesis and Analyses of Thermoelectric Lead Telluride // *Journal of Materials Science and Engineering.*, 3(1), pp. 32-39 (2013).

[7]. I. Horichok, R. Ahiska, D. Freik, L. Nykyruy, S. Mudry, O. Matkivskiy, T. Semko. Phase Content and Thermoelectric Properties of the Optimized Thermoelectric Structures Based on Ag-Pb-Sb-Te System // *Journal of Electronic Materials.*, 45(3), pp. 1576-1583 (2016).

[8]. Y. Ma, R. Heijl, A. Palmqvist. Composite thermoelectric materials with embedded nanoparticles // *J.Mater.Sci.*, 48, pp. 2762-2778 (2013).

[9]. R. Ja. Popil'skij, Ju. E. Pivinskij. Pressovanie poroshkovyh keramicheskikh mas. *Metalurgija*, M. 176 s. (1983) (*in Russian*).

[10]. D. M. Freik, I. V. Horichok, Yu. V. Lysyuk, L. Y. Mezhylovs'ka. Formuvannya defektnoyi pidsystemy telurydu svyntsyu pry hartuvanni // *Sensor Electronics and Microsystem Technologies.*, 2(8), pp. 37-45 (2011) (*in Ukrainian*).

[11]. D. M. Freik, I. V. Horichok, M. V. Shevchuk, L. V. Turovs'ka. Vlasni tochkovi defekty u plyumbum telurydi na mezhi oblasti homohennosti // *FKhTT.*, 12(2), pp. 378-388 (2011) (*in Ukrainian*).

Стаття надійшла до редакції 29.06.2017 р.

UDC 538.971

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.105564>**TECHNOLOGICAL ASPECTS OBTAINING OF THE THERMOELECTRIC PbTe**

*I. V. Horichok¹, I. M. Lischynskyy¹, S. I. Mudryy², A. S. Oberemok³, T. O. Semko¹,
I. M. Hatsevych³, O. M. Matkivskyy¹, G. D. Mateyik⁴, R. O. Dzumedzey¹*

¹Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76018, Ukraine, e-mail: HorichokIhor@gmail.com;

²Ivan Franko National University of Lviv, Kyryla and Mefodiya Str., 8, Lviv, 79005 Ukraine;

³V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics NAS of Ukraine, 41 pr. Nauki, 03028, Kyiv, Ukraine;

⁴Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas, 15, Carpathian Str., Ivano-Frankivsk, 76001, Ukraine.

Summary

Lead telluride is a semiconductor material used to create thermoelectric converters of medium temperature range (200-500) °C. The paper presents the results of the study of the influence of technological factors on the synthesis of polycrystalline ingots of PbTe on their phase composition and the structure and thermoelectric properties of the samples obtained by the method of cold pressing of the powder.

Synthesis of materials was carried out in vacuumed quartz ampoules. The resulting ingots were crushed and pressed at a pressure of 2.0 GPa. The phase composition and structure of synthesized ingots and samples were investigated by X-diffraction methods on an automatic diffractometer STOE STADI P. Elements composition and distribution of impurities on the depth of samples were investigated by the method of secondary ion mass spectrometry. Surface morphology was studied using a scanning electron microscope. Hall measurements were carried out in constant magnetic and electric fields using a four-zone method. The magnitude of the Seebeck coefficient α was calculated by measuring the voltage at the ends of the samples at a temperature gradient ≈ 5 °C. The specific electrical conductivity σ was determined by measuring the voltage drop on the sample at the passage of alternating current. The coefficient of thermal conductivity k was determined by the method of radial heat flux.

As a result of the studies, it was found that in order to produce single-phase, structurally homogeneous polycrystalline ingots, the quenching in the air is a more acceptable process of synthesis completion than slow cooling. Annealing of cold pressed samples at $T < 500$ °C leads to their seal, without significant effect on the values of α , σ , k . At $T_{\text{annealing}} = 500$ °C, the intercrystalline boundaries are restructured, which provides a significant increase in the specific electrical conductivity.

The obtaining of thermoelements by pressing the powder under pressure of 2 GPa ensures the obtaining of samples with high homogeneity along the compression axis and low porosity, which causes the impenetrability for oxygen deep into the samples and creates conditions for thermal processing on the air without degradation of its properties.

Keywords: lead telluride, synthesis, pressing, thermoelectric properties

УДК 538.971

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.105564>

ТЕХНОЛОГІЧНІ АСПЕКТИ ОТРИМАННЯ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОГО РЬТе

*І. В. Горічок¹, І. М. Ліщинський¹, С. І. Мудрий², О. С. Оберемок³, Т. О. Семко¹,
І. М. Хацевич³, О. М. Матківський¹, Г. Д. Матеїк⁴, Р. О. Дзумедзей¹*

¹ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»,
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76018, Україна; e-mail: HorichokIhor@gmail.com;

²Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, Львів, 79005, Україна;

³Інститут фізики напівпровідників імені В.С. Лашкарьова НАНУ,
Проспект науки, 41, Київ, 03028, Україна;

⁴Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу,
вул. Карпатська, 15, Івано-Франківськ, 76018, Україна.

Реферат

Телурид свинцю – напівпровідниковий матеріал, який використовується для створення на його основі термоелектричних перетворювачів середнього діапазону температур (200-500) °С. В роботі представлено результати дослідження впливу технологічних факторів синтезу полікристалічних зливків РЬТе на їх фазовий склад та структуру і термоелектричні властивості зразків отриманих методом холодного пресування порошку.

Синтез матеріалів проводили у вакуумованих кварцових ампулах. Отримані зливки подрібнювали та пресували під тиском 2,0 ГПа. Фазовий склад і структуру синтезованих зливків та зразків досліджували X-дифракційними методами на автоматичному дифрактометрі STOE STADI P. Елементний склад та розподіл домішок по глибині зразків досліджували методом вторинної іонної мас-спектрометрії. Морфологія поверхні вивчалась з використанням скануючого електронного мікроскопа. Дослідження ефекту Холла проводили у постійних магнітних та електричних полях чотиризондовим методом. Величину коефіцієнта термо-ЕРС вираховували вимірюючи напругу на кінцях зразка при створеному градієнті температур $\approx 5^\circ\text{C}$. Питому електропровідність σ визначали вимірюючи спад напруги на зразку при пропусканні змінного струму. Коефіцієнт теплопровідності k визначали методом радіального теплового потоку.

В результаті проведених досліджень, встановлено, що для отримання однофазних структурно однорідних полікристалічних зливків гартування на повітрі є більш прийнятним технологічним процесом завершення синтезу ніж повільне охолодження. Відпал холодно пресованих зразків при $T < 500^\circ\text{C}$. призводить до їх ущільнення, без суттєвого впливу на величини α , σ , k . При $T_{\text{відпалу}} = 500^\circ\text{C}$ відбувається реструктуризація міжкристалічних меж, що забезпечує значне підвищення питомої електропровідності.

Формування термоелементів методом пресування порошку під тиском 2 ГПа забезпечує отримання зразків з високою однорідністю вздовж осі пресування та низькою поруватістю, що є причиною непроникності кисню вглиб зразка та створює умови для термічної обробки на повітрі без деградації його властивостей.

Ключові слова: телурид свинцю, синтез, пресування, термоелектричні властивості

СЕНСОРИ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ СИСТЕМИ

SENSORS AND INFORMATION SYSTEM

PACS 32.80Dz; UDC 539.192

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111408>

NEW APPROACH AND MICROSYSTEM TECHNOLOGY OF ADVANCED ANALYSIS AND FORECASTING THE AIR POLLUTANT CONCENTRATION TEMPORAL DYNAMICS IN ATMOSPHERE OF THE INDUSTRIAL CITIES

*Yu. Ya. Bunyakova¹, A. V. Glushkov¹, O. Yu. Khetselius¹, A. V. Ignatenko¹, N. Bykowszczenko²,
V. V. Buyadzhi¹*

¹Odessa State Environmental University, L'vovskaya, 15, Odessa, 65016, Ukraine
E-mail: buyadzhivv@gmail.com

²Institute of Chemistry and Environmental Protection, Technical University of Szczecin,
Piastów 42 av., 71-065, Szczecin, Poland

NEW APPROACH AND MICROSYSTEM TECHNOLOGY OF ADVANCED ANALYSIS AND FORECASTING THE AIR POLLUTANT CONCENTRATION TEMPORAL DYNAMICS IN ATMOSPHERE OF THE INDUSTRIAL CITIES

*Yu. Ya. Bunyakova, A. V. Glushkov, O. Yu. Khetselius, V. V. Buyadzhi, A. V. Ignatenko,
N. Bykowszczenko*

Abstract. We present the results of an advanced analysis, modeling and forecasting a temporal dynamics of the air pollutant (dioxide of nitrogen) concentrations in an atmosphere of the industrial city (Odessa, Ukraine; Gdansk, Poland) using complex of new models and microsystem technology. An advanced non-linear analysis technique and modern chaos theory and dynamical systems methods have been applied. In order to analyse a measured time histories for the nitrogen dioxide concentrations in the Gdansk region the phase space of the system had been reconstructed by delay embedding. The mutual information approach, correlation integral analysis, false nearest neighbour algorithm, Lyapunov's exponent's analysis, and surrogate data method are used for comprehensive characterization. The correlation dimension method provided a low fractal-dimensional attractor thus

suggesting a possibility of the existence of chaotic behavior. Statistical significance of the results was confirmed by testing for a surrogate data. A chaotic behavior in the nitrogen dioxide concentration time series at several sites in the Gdansk city is numerically investigated and the Lyapunov's exponents, the Kaplan-Yorke dimension and Kolmogorov entropy are precisely computed. An advanced computing has confirmed an existence of a low-D chaos in the cited system and given the improved short-terminal forecast of the atmospheric pollutants fluctuations dynamics.

Keywords: new mathematical models, new microsystem technologies, anthropogenic factor, atmospheric pollutants fluctuations, time series analysis and prediction

НОВИЙ ПІДХІД І МІКРОСИСТЕМНА ТЕХНОЛОГІЯ ВДОСКОНАЛЕНОГО АНАЛІЗУ І ПРОГНОЗУ ЧАСОВОЇ ДИНАМІКИ КОНЦЕНТРАЦІЙ ЗАБРУДНЮЮЧИХ РЕЧОВИН В АТМОСФЕРІ ПРОМИСЛОВИХ МІСТ

Ю. Я. Бунякова, О. В. Глушков, О. Ю. Хецеліус, Г. В. Ігнатенко, Н. Биковщенко, В. В. Буяджи

Анотація. Представлені результати вдосконаленого аналізу, моделювання і прогнозування часової динаміки концентрацій забруднюючих речовин (двоокису азоту) в атмосфері промислових міст (Одеса, Україна, Гданськ, Польща) з використанням комплексу нових моделей і нової мікросистемної технології. Застосовані методика нелінійного аналізу, теорія хаосу і методи теорії динамічних систем. Для аналізу вимірних часових періодів концентрацій діоксиду азоту фазовий простір системи було реконструйовано методом затримок. З метою виконання вдосконаленого аналізу використовуються метод взаємної інформації, алгоритм кореляційного інтеграла, алгоритм помилкових найближчих сусідів, аналіз на основі показників Ляпунова і метод сурогатних даних. Метод кореляційної розмірності дозволив виявити дивний атрактор з низькою фрактальною розмірністю. Статистична значимість результатів була підтверджена тестуванням сурогатних даних. В рамках вдосконаленого підходу чисельно досліджена хаотична поведінка часових рядів концентрації двоокису азоту на декількох сайтах в містах Одеса (Україна) і Гданськ (Польща), розраховані показники Ляпунова, розмірності Каплана-Йорка і ентропія Колмогорова. Вдосконалений підхід природно підтвердив існування детерміністичного хаосу в досліджуваній системі. Запропоновано новий ефективний метод коротко-і середньотермінового прогнозування часової динаміки флуктуацій концентрацій забруднюючих атмосфери речовин на прикладі двоокису азоту

Ключові слова: нові математичні моделі, нові мікросистемні технології, антропогенний вплив, флуктуації атмосферних забруднювачів, аналіз та прогнозування часових рядів

НОВЫЙ ПОДХОД И МИКРОСИСТЕМНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ УСОВЕРШЕНСТВОВАННОГО АНАЛИЗА И ПРОГНОЗА ВРЕМЕННОЙ ДИНАМИКИ КОНЦЕНТРАЦИЙ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В АТМОСФЕРЕ ПРОМЫШЛЕННЫХ ГОРОДОВ

Ю. Я. Бунякова, А. В. Глушков, О. Ю. Хецелиус, А. В. Игнатенко, Н. Быковщенко, В. В. Буяджи

Аннотация. Представлены результаты усовершенствованного анализа, моделирования и прогнозирования временной динамики концентраций загрязняющих веществ (двуокиси азота) в атмосфере промышленных городов (Одесса, Украина, Гданьск, Польша) с использованием комплекса новых моделей и микросистемных технологий. Применены методика нелинейного анализа, теория современного хаоса и методы динамических систем. Для анализа измеренных временных периодов концентраций диоксида азота фазовое пространство системы было реконструировано методом задержек. С целью выполнения усовершенствованного анализа используются метод взаимной информации, алгоритм корреляционного интеграла, алгоритм ложных ближайших соседей, анализ на основе показателей Ляпунова и метод суррогатных данных. Метод корреляционной размерности позволил выявить странный аттрактор с низкой фрактальной размерностью. Статистическая значимость результатов была подтверждена тестированием суррогатных данных. В рамках усовершенствованного подхода численно исследовано хаотическое поведение временных рядов концентрации двуокиси азота на нескольких сайтах в городах Одесса (Украина) и Гданьск (Польша), рассчитаны показатели Ляпунова, размерности Каплана-Йорка и энтропия Колмогорова. Усовершенствованный подход естественно подтвердил существование детерминистического хаоса в исследуемой системе. Предложен новый эффективный метод коротко-и средне-срочного прогнозирования временной динамики флуктуаций концентраций загрязняющих атмосферу веществ на примере двуокиси азота.

Ключевые слова: новые математические модели, новые микросистемные технологии, антропогенные воздействия, флуктуации атмосферных загрязнителей, анализ и прогнозирование временных рядов

1. Introduction

At the present time one of the most actual, important and fundamental problems of modern applied ecology, environmental protection is a problem of the quantitative treating pollution dynamics in the industrial cities and at whole regions and a search of new mathematical tools for analysis, modelling and forecasting a temporal dynamics of the air pollutant (dioxide of nitrogen) concentrations in an atmosphere of the industrial cities and regions [1-20]. It is well known that the most models, that are currently used to estimate the air pollution level, are either deterministic or statistical, but their skilfulness are still limited due to both inability for describing non-linearities in pollutant time series and lack of understanding

involved physical and/or chemical processes. In Ref. [6] there is an analysis of the CO, O₃ concentrations time series. Also, it was shown that O₃ concentrations in Cincinnati (Ohio) and Istanbul are evidently chaotic, and non-linear approach provides satisfactory results [6]. In ref. [1-3] there is an analysis of the SO₂, CO, O₃ concentrations time series in a few industrial cities and it has been definitely received an evidence of chaos. More over it has been given a preliminary short-range forecasting atmospheric pollutants dynamics using the non-linear prediction method. These studies show that chaos theory methodology can be applied and the short-range forecast by the non-linear prediction method can be satisfactory.

In this paper we present the results of an advanced analysis, modeling and forecasting a

temporal dynamics of the air pollutant (dioxide of nitrogen) concentrations in an atmosphere of the industrial city (Odessa, Ukraine and Gdansk, Poland) using a complex of new models and microsystem technology. An advanced non-linear analysis technique and modern chaos theory and dynamical systems methods have been applied (in versions [1-3,14-22]). An advanced computing has confirmed an existence of a low-D chaos in the pollutant dynamics and given the accurate short-terminal forecast of the atmospheric pollutants fluctuations. All calculations are performed with using “Geomath”, “Superatom” and “Quantum Chaos” computational codes [14-78].

2. Technique of analysis and computing atmospheric pollutants fluctuations temporal dynamics

The key elements of the technique of computing atmospheric pollutants fluctuations dynamics are described in details in Refs. [1-3,14-22]. Here we are limited only by the key aspects. Let us consider scalar measurements:

$$s(n)=s(t_0 + n\Delta t) = s(n), \quad (1)$$

where t_0 is a start time, Δt is time step, and n is number of the measurements. In our case $s(n)$ is the time series of the atmospheric pollutants concentration. As processes resulting in a chaotic behaviour are fundamentally multivariate, one needs to reconstruct phase space using as well as possible information contained in $s(n)$. The main idea is that direct use of lagged variables $s(n+\tau)$, where τ is some integer to be defined, results in a coordinate system where a structure of orbits in phase space can be captured. Using a collection of time lags to create a vector in d dimensions,

$$\mathbf{y}(n)=[s(n),s(n + \tau),s(n + 2\tau),\dots,s(n +(d-1)\tau)], \quad (2)$$

the required coordinates are provided.

The dimension d is the embedding dimension, d_E . The goal of the embedding dimension determination is to reconstruct a Euclidean space R^d large enough so that the set of points d_A can be unfolded without ambiguity. The embedding

dimension, d_E , must be greater, or at least equal, than a dimension of attractor, d_A , i.e. $d_E > d_A$. So, to analyse a measured time histories for the nitrogen dioxide concentrations, the phase space of the system had been reconstructed by the delay embedding.

Further the advanced versions of the mutual information approach, correlation integral analysis, false nearest neighbour algorithm, Lyapunov’s exponent’s analysis, and surrogate data method are used for comprehensive characterization [7-15]. The correlation dimension method provides a fractal-dimensional attractor. Statistical significance of the results was confirmed by testing for a surrogate data. The choice of proper time lag is important for the subsequent reconstruction of phase space. First approach is to compute the linear autocorrelation function $C_L(\delta)$ and to look for that time lag where $C_L(\delta)$ first passes through 0. This gives a good hint of choice for τ at that $s(n+j\tau)$ and $s(n+(j +1)\tau)$ are linearly independent. Alternative approach is given by a nonlinear concept of independence, e.g. an average mutual information [8] (see [14,15 too).

In order to compute an attractor dimension one should use the correlation integral analysis, which is one of the widely used techniques to investigate the signatures of chaos in a time series. According to [9], one must compute the correlation integral $C(r)$. If the time series is characterized by an attractor, then the correlation integral $C(r)$ is related to the radius r as [9]

$$d = \lim_{\substack{r \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \frac{\log C(r)}{\log r}, \quad (3)$$

where d is correlation exponent. If the correlation exponent attains saturation with an increase in the embedding dimension, then the system is generally considered to exhibit chaotic dynamics. The saturation value of correlation exponent is defined as the correlation dimension (d_2) of the attractor (see details in refs. [1,9]).

Further let us note that the spectrum of the Lyapunov’s exponents is one of dynamical invariants for non-linear system with chaotic behaviour. The limited predictability of the chaos is quantified by the local and the global Lyapunov’s exponents, which can be determined from measurements.

The Lyapunov's exponents are related to the eigenvalues of the linearized dynamics across the attractor. Negative values show stable behaviour while positive values show local unstable behaviour. The predictability can be estimated by the Kolmogorov entropy, which is proportional to a sum of the positive Lyapunov's exponents. For chaotic systems, being both stable and unstable, the Lyapunov's exponents indicate the complexity of the dynamics. The largest positive value determines some average prediction limit. Since the Lyapunov's exponents are defined as asymptotic average rates, they are independent of the initial conditions, and hence the choice of trajectory, and they do comprise an invariant measure of the attractor. An estimate of this measure is a sum of the positive Lyapunov's exponents. The estimate of the attractor dimension is provided by the conjecture d_L and the Lyapunov's exponents are taken in descending order. To compute Lyapunov's exponents, we use a method with linear fitted map [2], although the maps with higher order polynomials can be used too.

The principally important topic is development of an advanced approach to prediction of chaotic properties of complex systems. Our key idea is in the using the traditional concept of a compact geometric attractor in which evolves the measurement data, plus the implementation of neural network algorithms. The existing so far in the theory of chaos prediction models are based on the concept of an attractor. The meaning of the concept is in fact a study of the evolution of the attractor in the phase space of the system and, in a sense, modelling ("guessing") time-variable evolution.. From a mathematical point of view, it is a fact that in the phase space of the system an orbit continuously rolled on itself due to the action of dissipative forces and the nonlinear part of the dynamics, so it is possible to stay in the neighborhood of any point of the orbit $y(n)$ other points of the orbit $y^r(n)$, $r = 1, 2, \dots, N_B$, which come in the neighborhood $y(n)$ in a completely different times than n . Of course, then one could try to build different types of interpolation functions that take into account all the neighborhoods of the phase space and at the same time explain how the neighborhood evolve from $y(n)$ to a whole fam-

ily of points about $y(n+1)$. Use of the information about the phase space in the simulation of the evolution of some geophysical (environmental, etc.) of the process in time can be regarded as a fundamental element in the simulation of random processes. In terms of the modern theory of neural systems, and neuro-informatics (e.g. [16,17]), the process of modelling the evolution of the system can be generalized to describe some evolutionary dynamic neuro-equations (miemo-dynamic equations). Imitating the further evolution of a complex system as the evolution of a neural network with the corresponding elements of the self-study, self-adaptation, etc., it becomes possible to significantly improve the prediction of evolutionary dynamics of a chaotic system.

Considering the neural network (in this case, the appropriate term "geophysical" neural network) with a certain number of neurons, as usual, we can introduce the operators S_{ij} synaptic neuron to neuron u_i, u_j , while the corresponding synaptic matrix is reduced to a numerical matrix strength of synaptic connections: $W = || w_{ij} ||$.

The operator is described by the standard activation neuro-equation determining the evolution of a neural network in time: $s'_i = \text{sign}(\sum_{j=1}^N w_{ij}s_j - \theta_i)$, where $1 < i < N$. From the point of view of the theory of chaotic dynamical systems, the state of the neuron (the chaos-geometric interpretation of the forces of synaptic interactions, etc.) can be represented by currents in the phase space of the system and its the topological structure is obviously determined by the number and position of attractors.

These idea have been used in order to make more advanced the wide spread prediction model which is based on the constructing a parameterized nonlinear function $F(x, a)$, which transform $y(n)$ to $y(n+1) = F(y(n), a)$, and then using different criteria for determining the parameters a . As it is shown by Schreiber [13], the most common form of the local model is very simple :

$$s(n + \Delta n) = a_0^{(n)} + \sum_{j=1}^{d_A} a_j^{(n)} s(n - (j-1)\tau), \quad (4)$$

where Δn - the time period for which a forecast.

The coefficients $a_j^{(k)}$, may be determined by a least-squares procedure, involving only points $s(k)$ within a small neighbourhood around the reference point. Thus, the coefficients will vary throughout phase space. The fit procedure amounts to solving $(d_A + 1)$ linear equations for the $(d_A + 1)$ unknowns. Further, since there is the notion of local neighborhoods, one could create a model of the process occurring in the neighborhood, at the neighborhood and by combining together these local models to construct a global nonlinear model that describes most of the structure of the attractor. In order to get more advanced prediction of chaotic dynamics we have applied the polynomial model with using the neural network algorithm [16].

3. The advanced data for the nitrogen dioxide concentrations time series of the industrial cities and conclusions

In our study, we used the nitrogen dioxide concentration data observed at several sites of the Gdansk on 2003-2004, namely, the multi year hourly concentrations (one year total of 20x8760 data points) and the Odessa on 2001-2006, namely, the multi year hourly concentrations (one year total of 20x6570 data points). The temporal series of concentrations (in mg/m³) of the NO₂ are presented in figure 1 (for two sites). Let us note that in the Gdansk region, the Agency of Regional Air Quality Monitoring (ARMAAG) provides presently the 24-h forecasts of air quality levels using the model called CALMET/CALPUFF (CALPUFF) (see [1-4] and ref. therein).

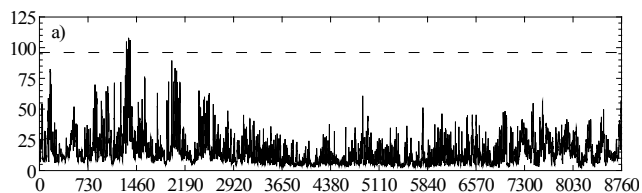


Figure 1a. The temporal series of concentrations (in mg/m³) of the of the NO₂ (cite 1; see text).

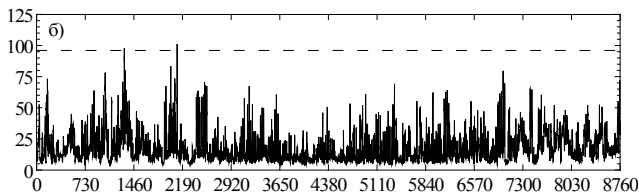


Figure 1b. The temporal series of concentrations (in mg/m³) of the of the NO₂ (cite 2; see text).

In Figure 2 we list the computed Fourier spectrum for the studied NO₂ time series. Having regard to the irregular nature of the changes of concentration it is not surprising that these spectra look the same as in a random process. In figure 3 we list the computed dependence of the correlation integral $C(r)$ of radius r for different embedding dimensions d for the NO₂ at one of the sites of the Gdansk during 2003.

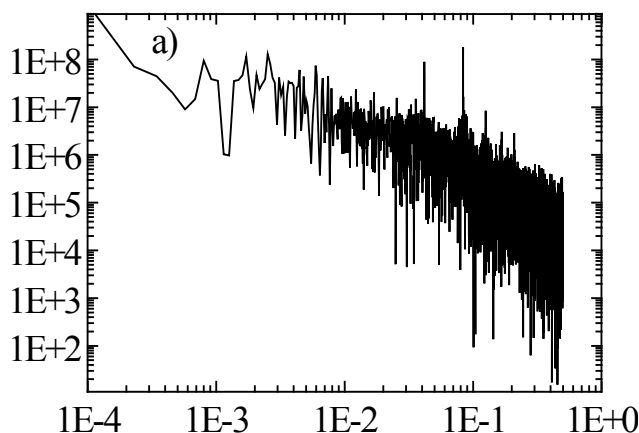


Figure 2. The Fourier spectrum for the NO₂ concentration series in the Gdansk region: X – frequency, Y - energy (see text).

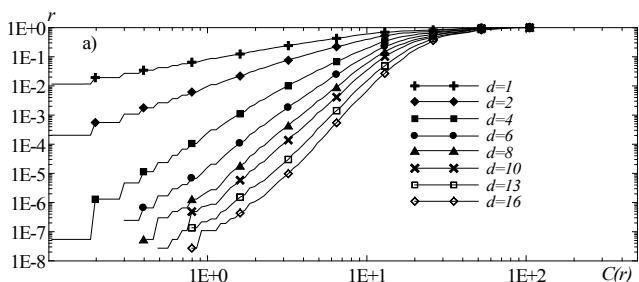


Figure 3. The dependence of the correlation integral $C(r)$ of radius r for different embedding dimensions d for NO₂ (b) at the site 6 of the Gdansk during 2003.

In the Table 1 we list the data for the time lag calculated for first 103 values of time series. The autocorrelation function for all time series remains positive. In the Table 2 we present our advanced data on the correlation dimension (d_2), embedding dimension (d_E), Kaplan-Yorke dimension (d_L), two Lyapunov's exponents (λ_1, λ_2), the Kaplan-Yorke dimension (d_L), and average limit of predictability (Pr_{max} , hours) for time series of the NO₂ at sites of the Gdansk (during 2003 year).

Table 1
Time lags (hours) subject to different values of C_L , and first minima of average mutual information, I_{min1} , for the time series of NO₂ at the sites of Gdansk

	$C_L = 0$	$C_L = 0,1$	$C_L = 0,5$	I_{min1}
Site 1				
SO ₂	–	138	7	10
Site 2				
SO ₂	103	55	5	9

From the table 2 it can be noted that the Kaplan-Yorke dimensions, which are also the attrac-

tor dimensions, are smaller than the dimensions obtained by the algorithm of false nearest neighbours.

Firstly, one should note that the presence of the two (from six) positive λ_i suggests the system broadens in the line of two axes and converges along four axes that in the six-dimensional space. The time series of the NO₂ at the site 2 have the highest predictability (more than 2 days), and other time series have the predictabilities slightly less than 2 days. The concrete example is presented in Figure 4, where the empirical (solid line 1) and theoretical forecasting (solid line 2 by the Schreiber-type prediction algorithm with neural networks block and dotted line 3 by the standard Schreiber-type algorithm) concentration lines NO₂ (for the one hundred points) are presented.

In whole an analysis shows that almost all the peaks on the actual curve repeated on the prognostic difference between the forecast and the actual data in the event of high concentrations of the ingredients can be quite large. The prediction line 2 looks more exact in comparison with actual data. More detailed analysis of this fact will be presented in another paper.

Table 2
The correlation dimension (d_2), embedding dimension (d_E), first two Lyapunov's exponents, $E(\lambda_1, \lambda_2)$, Kaplan-Yorke dimension (d_L), and average limit of predictability (Pr_{max} , hours) for time series of NO₂ at the Gdansk sites (during 2003)

	τ	d_2	d_E	λ_1	λ_2	d_L	Pr_{max}	K
Site 1								
NO ₂	9	5,31	6	0,0185	0,0060	4,11	41	0,68
Site 2								
NO ₂	8	5,31	6	0,0188	0,0052	3,85	42	0,66

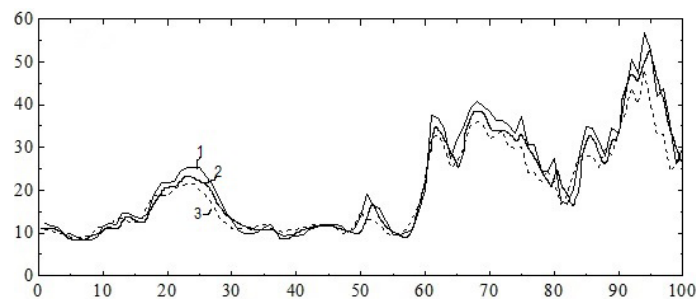


Figure 4. The empirical (solid line 1) and forecasting (solid line 2 and dotted line 3) NO₂ concentration lines for the last one hundred points (see text).

Here we only note that the results of our computational forecasting can be considered quite satisfactory.

References

- [1]. Bunyakova Yu. Ya., Glushkov A. V.: Analysis and forecast of the impact of anthropogenic factors on air basin of an industrial city. Odessa, Ecology, 2010.
- [2]. Bunyakova Yu. Ya., Khetselius O. Yu., Non-linear prediction statistical method in forecast of atmospheric pollutants// Proc. of 8th International Carbon Dioxide Conference. -2009. -P. T2-098.
- [3]. Khokhlov V. N., Glushkov A. V., Loboda A. S., Bunyakova Yu. Ya., Short-range forecast of atmospheric pollutants using non-linear prediction method// *Atm. Env. (Elsevier)*. -2008. -Vol. 42. -P. 7284-7292.
- [4]. CALPUFF, Available from: <http://www.src.com/calpuff/calpuff1.htm>
- [5]. Fraser A. M., Swinney H. L., Independent coordinates for strange attractors from mutual information// *Phys. Rev. A.* – 1986. – Vol. 33. – P. 1134–1140.
- [6]. Chelani A. B. Predicting chaotic time series of PM10 concentration using artificial neural network // *Int. J. Environ. Stud.* – 2005. – Vol. 62. – P. 181–191
- [7]. Kennel M. B., Brown R., Abarbanel H. D. I., Determining embedding dimension for phase-space reconstruction using a geometrical construction// *Phys. Rev. A.* – 1992. – Vol. 45. – P. 3403–3411.
- [8]. Gallager R. G.: *Information theory and reliable communication.* NY: Wiley, 1968.
- [9]. Grassberger P, Procaccia I., Measuring the strangeness of strange attractors// *Physica D.* – 1983. – Vol. 9. – P. 189–208.
- [10]. Gottwald G. A., Melbourne I., Testing for chaos in deterministic systems with noise// *Physica D.* – 2005. – Vol. 212. – P. 100–110.
- [11]. Packard N. H., Crutchfield J. P., Farmer J. D., Shaw R. S., Geometry from a time series // *Phys. Rev. Lett.* – 1980. – Vol. 45. – P. 712–716.
- [12]. Abarbanel H. D. I., Brown R., Sidorowich J. J., Tsimring L. Sh., The analysis of observed chaotic data in physical systems// *Rev. Mod. Phys.* – 1993. – Vol. 65. – P. 1331–1392.
- [13]. Schreiber T. Interdisciplinary application of nonlinear time series methods // *Phys. Rep.* – 1999. – Vol. 308. – P. 1–64.
- [14]. Glushkov A. V., Khetselius O. Y., Brusentseva S. V., Zaichko P. A., Ternovsky V. B., Studying interaction dynamics of chaotic systems within a non-linear prediction method: application to neurophysiology// *Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence, Series: Recent Advances in Computer Engineering*, Ed. J. Balicki. -2014. -Vol. 21. -P. 69-75.
- [15]. Glushkov A. V., Svinarenko A. A., Buyadzhi V. V., Zaichko P., Ternovsky V., Chaos-geometric attractor and quantum neural networks approach to simulation chaotic evolutionary dynamics during perception process// *Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence, Series: Recent Advances in Computer Engineering*, Ed. J. Balicki. -2014. -Vol. 21. -P. 143-150.
- [16]. Glushkov A. V., Khokhlov V. N., Prepelitsa G. P., Tsenenko I. A. Temporal variability of the atmosphere ozone content: Effect of North-Atlantic oscillation// *Optics of atmosphere and ocean.* -2004. -Vol. 14,N7. -p. 219-223.
- [17]. Glushkov A. V., Kuzakon' V. M., Khetselius O. Yu., Bunyakova Yu. Ya., Zaichko P. A. Geometry of Chaos: Consistent combined approach to treating chaotic dynamics atmospheric pollutants and its forecasting// *Proceedings of International Geometry Center.* -2013. -Vol. 6,N3. -P. 6-13.
- [18]. Glushkov A. V., Khetselius O. Y., Bunyakova Yu. Ya., Prepelitsa G. P., Solyanikova E. P., Serga E., Non-linear prediction method in short-range forecast of atmospheric pollutants: low-dimensional chaos// *Dynamical Systems - Theory and Applications (Lodz)*. -2011. -P. LIF111.
- [19]. Khetselius O. Yu., Forecasting evolutionary dynamics of chaotic systems using advanced non-linear prediction method// *Dynamical Systems – Theory and Applications*, Eds. J.

- Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J. Mrozowski. -2013. -Vol. 1. -P. 145-152.
- [20]. Glushkov A. V., Kuzakon V. M., Ternovsky V. B., Buyadzhi V. V., Dynamics of laser systems with absorbing cell and backward-wave tubes with elements of a chaos// Dynamical Systems – Theory and Applications, Eds. J. Awrejcewicz, M. Kazmierczak, P. Olejnik, J. Mrozowski. -2013. -Vol. T1. -P. 461-466.
- [21]. Buyadzhi V. V., Glushkov A. V., Mansarliysky V. F., Ignatenko A. V., Svinarenko A. A., Spectroscopy of atoms in a strong laser field: New method to sensing AC Stark effect, multiphoton resonances parameters and ionization cross-sections//Sensor Electr. and Microsyst. Techn. -2015. -Vol. 12,N4. -P. 27-36.
- [22]. Glushkov A. V., Mansarliysky V. F., Khetselius O. Yu., Ignatenko A. V., Smirnov A., Prepelitsa G. P., Collisional shift of hyperfine line for thallium in an atmosphere of the buffer inert gas // Journal of Physics: C Series (IOP, London, UK). -2017. -Vol. 810. -P. 012034.
- [23]. Buyadzhi V. V., Zaichko P. A., Gurskaya M., Kuznetsova A. A., Ponomarenko E. L., Ternovsky E.,Relativistic theory of excitation and ionization of Rydberg atoms in a Blackbody radiation field//J. Phys.: Conf. Series. -2017. -Vol. 810. -P. 012047.
- [24]. Glushkov A. V., Spectroscopy of atom and nucleus in a strong laser field: Stark effect and multiphoton Resonances// J. Phys.: Conf. Series (IOP). -2014. -Vol. 548. -P. 012020.
- [25]. Glushkov A. V., Relativistic Quantum Theory. Quantum mechanics of Atomic Systems. -Odessa: Astroprint, 2008. - 700P.
- [26]. Svinarenko A. A., Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Ternovsky V. B., Dubrovskaya Yu. V., Kuznetsova A. A., Buyadzhi V. V., Theoretical Spectroscopy of Rare-Earth Elements: Spectra and Autoionization Resonances// Rare Earth Element, Ed. Jose E. A. Orjuela. -InTech. -2017. -P. 83-104 (DOI: 10. 5772/intechopen. 69314).
- [27]. Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Svinarenko A. A., Buyadzhi V. V., Ternovsky V. B., Kuznetsova A. A., Bashkarev P. G., Relativistic Perturbation Theory Formalism to Computing Spectra and Radiation Characteristics: Application to Heavy Element// Recent Studies in Perturbation Theory, Ed. Dimo I. Uzunov. -InTech. -2017. -P. 131-150 (DOI: 10. 5772/intechopen. 69102).
- [28]. Glushkov A. V., Malinovskaya S. V., Chernyakova Yu. G., Svinarenko A. A. Cooperative laser-electron-nuclear processes: QED calculation of electron satellites spectra for multi-charged ion in laser field//Int. Journ. Quant. Chem. - 2004. -Vol. 99,N6. -P. 889-893.
- [29]. Glushkov A. V., Negative ions of inert gases// JETP Lett. -1992. -Vol. 55, Issue 2. -P. 97-100.
- [30]. Ivanova E. P., Ivanov L. N., Glushkov A. V., Kramida A. E., High Order Corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the Model Zeroth Approximation, Mg-Like and Ne-Like Ions//Phys. Scripta. –1985. -Vol. 32,N5. -P. 513-522.
- [31]. Glushkov A. V., Ivanov L. N., Ivanova E. P., Radiation decay of atomic states. Generalized energy approach// Autoionization Phenomena in Atoms. - M.: Moscow State University. -1986. –P. 58-160.
- [32]. Glushkov A. V., Ivanov L. N., Radiation decay of atomic states: atomic residue polarization and gauge noninvariant contributions// Phys. Lett. A. -1992. -Vol. 170, N1. -P. 33-36.
- [33]. Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Svinarenko A. A., Relativistic theory of cooperative muon-gamma-nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge// Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics (Springer). -2012. -Vol. 22. -P. 51-68.
- [34]. Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Loboda A. V., Svinarenko A. A., QED approach to atoms in a laser field: Multi-photon resonances and above threshold ionization//Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Springer). -2008. -Vol. 18. -P. 543-560.
- [35]. Glushkov A. V., Svinarenko A. A., Ignatenko A. V., Spectroscopy of autoionization resonances in spectra of the lanthanides atoms// Photoelectronics. -2011. -Vol. 20. -P. 90-94.
- [36]. Svinarenko A. A., Nikola L. V., Prepelitsa G. P., Tkach T., Mischenko E., The Auger (au-

- toionization) decay of excited states in spectra of multicharged ions: Relativistic theory// Spectral Lines Shape. -2010. -Vol. 16. -P. 94-98
- [37]. Svinarenko A. A., Spectroscopy of autoionization resonances in spectra of barium: New spectral data // Phototelectronics. -2014. -Vol. 23. -P. 85-90.
- [38]. Malinovskaya S V, Glushkov A V, Khetselius O Yu, Svinarenko A A, Mischenko E. V., Florko T. A., Optimized perturbation theory scheme for calculating the interatomic potentials and hyperfine lines shift for heavy atoms in the buffer inert gas//Int. Journ. of Quantum Chemistry. -2009. -Vol. 109, Issue 14. -P. 3325-3329.
- [39]. Glushkov A V, Ambrosov S V, Loboda A V, Chernyakova Yu, Svinarenko A A, Khetselius O Yu, QED calculation of the superheavy elements ions: energy levels, radiative corrections, and hfs for different nuclear models// Journal Nucl. Phys. A.: nucl. and hadr. Phys. -2004. -Vol. 734. -P. 21
- [40]. Glushkov A. V., Khetselius O. Y., Malinovskaya S. V., New laser-electron nuclear effects in the nuclear γ transition spectra in atomic and molecular systems//Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Springer). -2008. -Vol. 18. -P. 525-541.
- [41]. Khetselius O. Yu., Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes// Int. Journ. of Quantum Chemistry. -2009. -Vol. 109, Issue 14. -P. 3330-3335.
- [42]. Glushkov A V, Ivanov L N, DC strong-field Stark effect: consistent quantum-mechanical approach// Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Phys. -1993. -Vol. 26,N14. -P. L379 –386.
- [43]. Glushkov A. V., Relativistic and correlation effects in spectra of atomic systems. -Odessa: Astroprint. -2006. -400P.
- [44]. Glushkov A. V., Atom in electromagnetic field. -Kiev: KNT, 2005.
- [45]. Glushkov A. V., Malinovskaya S. V., Sukharev D. E., Khetselius O. Yu., Loboda A. V., Lovett L., Green's function method in quantum chemistry: New numerical algorithm for the Dirac equation with complex energy and Fermi-model nuclear potential//Int. Journ. Quant. Chem. -2009. - Vol. 109, N8. -P. 1717-1727.
- [46]. Glushkov A. V., Kondratenko P. A., Lepikh Ya., Fedchuk A. P., Svinarenko A. A., Lovett L., Electrodynamical and quantum - chemical approaches to modelling the electrochemical and catalytic processes on metals, metal alloys and semiconductors//Int. Journ. Quantum Chem. . -2009. -Vol. 109,N14. -P. 3473-3481.
- [47]. Khetselius O. Yu., Relativistic calculating the hyperfine structure parameters for heavy-elements and laser detecting the isotopes and nuclear reaction products//Phys. Scripta. -2009. -T. 135. -P. 014023.
- [48]. Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Lovett L., Electron- β -Nuclear Spectroscopy of Atoms and Molecules and Chemical Environment Effect on the β -Decay parameters// Advances in the Theory of Atomic and Molecular Systems Dynamics, Spectroscopy, Clusters, and Nanostructures. Series: Progress in Theor. Chem. and Phys. , Eds. Piecuch P., Maruani J., Delgado-Barrio G., Wilson S. (Springer). -2009. -Vol. 20. -P. 125-152.
- [49]. Glushkov A. V., Svinarenko A. A., Khetselius O. Yu., Buyadzhi V. V., Florko T. A., Shakhman A. N., Relativistic Quantum Chemistry: Advanced approach to construction of the Green's function of the Dirac equation with complex energy and mean-field nuclear potential// Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chem. and Physics. Ser.: Progress in Theor. Chem. and Phys., Eds. M. Nascimento, J. Maruani, E. Brändas, G. Delgado-Barrio (Springer). -2015-Vol. 29. -P. 197-217.
- [50]. Khetselius O. Yu., Optimized perturbation theory to calculating the hyperfine line shift and broadening for heavy atoms in the buffer gas// Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chemistry and Physics. Ser.: Progress in Theor. Chem. and Phys. (Springer). -2015-Vol. 29. -P. 55-76.
- [51]. Glushkov A. V., Malinovskaya S. V., New approach to the formation of model potential

- for valence-electrons//Zhurn. Fizich. Khimii. -1988. -Vol. 62(1). -P. 100-104.
- [52]. Glushkov A. V., Lepikh Ya. I., Khetselius O. Yu., Fedchuk A. P., Ambrosov S. V., Ignatenko A. V., Wannier-mott excitons and atoms in a DC electric field: photoionization, Stark effect, resonances in the ionization continuum// Sensor Electr. and Microsyst. Techn. -2008. -N4. -P. 5-11.
- [53]. Khetselius O. Yu., Relativistic energy approach to cooperative electron- γ -nuclear processes: NEET Effect// Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications. Ser.: Progress in Theor. Chem. and Phys. (Springer). -2012-Vol. 26. -P. 217-229.
- [54]. Khetselius O Yu, Relativistic calculation of the hyperfine structure parameters for heavy elements and laser detection of the heavy isotopes// Phys. Scripta. -2009. -Vol. T135. -P. 014023.
- [55]. Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Gurnitskaya E. P., Loboda A. V., Florko T. A., Sukharev D. E., Lovett L., Gauge-Invariant QED Perturbation Theory Approach to Calculating Nuclear Electric Quadrupole Moments, Hyperfine Structure Constants for Heavy Atoms and Ions//Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics (Springer), 2008. -Vol. 18. -P. 507-524.
- [56]. Glushkov A. V., Ambrosov S. V., Loboda A. V., Gurnitskaya E. P., Prepelitsa G. P., Consistent QED approach to calculation of electron-collision excitation cross sections and strengths: Ne-like ions// Int. Journal Quantum Chem. -2005. -Vol. 104, Issue 4. -P. 562–569.
- [57]. Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Malinovskaya S. V., Optics and spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear processes in atomic and molecular systems - new trend in quantum optics// Europ. Phys. Journ. ST. -2008. -Vol. 160, Issue 1. -P. 195-204.
- [58]. Malinovskaya S. V., Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Svinarenko A., Bakunina E. V., Florko T. A., The optimized perturbation theory scheme for calculating interatomic potentials and hyperfine lines shift for heavy atoms in buffer inert gas//Int. Journ. of Quantum Chemistry. -2009. -Vol. 109. -P. 3325-3329.
- [59]. Khetselius O. Yu., Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes// Int. Journ. of Quantum Chemistry. -2009. -Vol. 109,N14. -P. 3330-3335.
- [60]. Glushkov A. V., Svinarenko A. A., Khetselius O. Y., Buyadzhi V. V., Florko T. A., Shakhman A., Relativistic quantum chemistry: An Advanced approach to the construction of the Green function of the Dirac equation with complex energy and mean-field nuclear potential// Frontiers in Quantum Methods and Applications in Chemistry and Physics. -2015. -Vol. 29. -P. 197-217.
- [61]. Ternovsky V. B., Glushkov A. V., Zaichko P., Khetselius O. Yu., Florko T. A., New relativistic model potential approach to sensing radiative transitions probabilities in spectra of heavy Rydberg atomic systems// Sensor Electr. and Microsyst. Techn. -2015. -Vol. 12,N4. -P. 19-26.
- [62]. Buyadzhi V. V., Glushkov A. V., Mansarliysky V. F., Ignatenko A. V., Svinarenko A. A., Spectroscopy of atoms in a strong laser field: New method to sensing AC Stark effect, multiphoton resonances parameters and ionization cross-sections//Sensor Electr. and Microsyst. Techn. -2015. -Vol. 12,N4. -P. 27-36.
- [63]. Glushkov A. V., Mansarliysky V. F., Khetselius O. Yu., Ignatenko A. V., Smirnov A., Prepelitsa G., Collisional shift of hyperfine line for thallium in an atmosphere of the buffer inert gas//J. Phys.: Conf. Ser. (IOP). -2017. -Vol. 810. -P. 012034.
- [64]. Buyadzhi V. V., Zaichko P. A., Gurskaya M., Kuznetsova A. A., Ponomarenko E. L., Ternovsky E., Relativistic theory of excitation and ionization of Rydberg atoms in a Blackbody radiation field//J. Phys.: Conf. Series. -2017. -Vol. 810. -P. 012047.
- [65]. Ivanova E P, Glushkov A V, Theoretical investigation of spectra of multicharged ions of F-like and Ne-like isoelectronic sequences// Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. -1986. -Vol. 36, Issue 2. -P. 127-145.

- [66]. Khetselius O. Yu., Hyperfine structure of atomic spectra. - Odessa: Astroprint, 2008. -210P.
- [67]. Khetselius O. Yu., Hyperfine structure of radium// Photoelectronics. -2005. -N14. -P. 83-85.
- [68]. Khetselius O., Spectroscopy of cooperative electron-gamma-nuclear processes in heavy atoms: NEET effect// J. Phys.: Conf. Ser. -2012. - Vol. 397. -P. 012012
- [69]. Svinarenko A. A., Study of spectra for lanthanides atoms with relativistic many-body perturbation theory: Rydberg resonances// J. Phys.: Conf. Ser. -2014. -Vol. 548. -P. 012039.
- [70]. Svinarenko A. A., Ignatenko A. V., Ternovsky V. B., Nikola V. V., Seredenko S. S., Tkach T. B., Advanced relativistic model potential approach to calculation of radiation transition parameters in spectra of multicharged ions// J. Phys.: Conf. Ser. -2014. -Vol. 548. -P. 012047.
- [71]. Svinarenko A. A., Khetselius O. Yu., Buyadzhi V. V., Florko T. A., Zaichko P. A., Ponomarenko E. L., Spectroscopy of Rydberg atoms in a Black-body radiation field: Relativistic theory of excitation and ionization// J. Phys.: Conf. Ser. -2014. -Vol. 548. -P. 012048.
- [72]. Glushkov A. V., Khetselius O. Yu., Bunyakova Yu. Ya., Buyadzhi V. V., Brusentseva S. V., Zaichko P. A., Sensing interaction dynamics of chaotic systems within a chaos theory and microsystem technology Geomath with application to neurophysiological systems// Sensor Electr. and Microsyst. Techn. -2014. -Vol. 11,N3. -P. 62-69.
- [73]. Glushkov A. V., Energy Approach to Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nuclei collisions// Low Energy Antiproton Phys. AIP Conference Proceedings. -2005. -Vol. 796 (1). -P. 206-210.
- [74]. Sukharev D. E., Khetselius O. Yu., Dubrovskaya Yu. V., Sensing strong interaction effects in spectroscopy of hadronic atoms// Sensor Electr. and Microsyst. Techn. -2009. -N3. -P. 16-21.
- [75]. Khetselius O. Yu., On possibility of sensing nuclei of the rare isotopes by means of laser spectroscopy of hyperfine structure//Sensor Electr. and Microsyst. Techn. -2008. -Vol. 3. -P. 28-33.
- [76]. Khetselius O. Y., Gurnitskaya E. P., Sensing the hyperfine structure and nuclear quadrupole moment for radium// Sensor Electr. and Microsyst. Techn. -2006. -N2. -P. 25-29.
- [77]. Prepelitsa G. P., Glushkov A. V., Lepikh Ya. I., Buyadzhi V. V., Ternovsky V. B., Zaichko P. A., Chaotic dynamics of non-linear processes in atomic and molecular systems in electromagnetic field and semiconductor and fiber laser devices: new approaches, uniformity and charm of chaos// Sensor Electr. and Microsyst. Techn. -2014. -Vol. 11,N4. -P. 43-57.
- [78]. Khetselius O. Yu., Florko T. A., Svinarenko A. A., Tkach T. B., Radiative and collisional spectroscopy of hyperfine lines of the Li-like heavy ions and Tl atom in an atmosphere of inert gas//Phys. Scripta. -2013. -Vol. T153-P. 014037.

Стаття надійшла до редакції 12.09.2017 р.

PACS 32.80Dz; UDC 539.192

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.111408>

NEW APPROACH AND MICROSYSTEM TECHNOLOGY OF ADVANCED ANALYSIS AND FORECASTING THE AIR POLLUTANT CONCENTRATION TEMPORAL DYNAMICS IN ATMOSPHERE OF THE INDUSTRIAL CITIES

Yu. Ya. Bunyakova¹, A. V. Glushkov¹, O. Yu. Khetselius¹, A. V. Ignatenko¹, N. Bykowszczenko², V. V. Buyadzhi¹

¹Odessa State Environmental University, L'vovskaya, 15, Odessa, 65016, Ukraine

E-mail: buyadzhivv@gmail.com

²Institute of Chemistry and Environmental Protection, Technical University of Szczecin, Piastów 42 av., 71-065, Szczecin, Poland

Summary

The aim of the work is to develop and present a new approach and correspondingly a new microsystem technology for advanced analysis, modelling and forecasting the air pollutant concentration temporal dynamics in atmosphere of the industrial cities and apply it to studying a temporal dynamics of the air pollutant concentrations for the concrete large industrial cities. We present the results of an advanced analysis, modelling and forecasting air pollutant (on the example of the dioxide of nitrogen) concentrations in an atmosphere of the Odessa (Ukraine) and Gdansk (Poland) using a group of new models and new microsystem technology.

An advanced non-linear analysis technique and modern chaos theory and dynamical systems methods have been applied. In order to analyse a measured time histories for the nitrogen dioxide concentrations in the Gdansk region the phase space of the system had been reconstructed by delay embedding. The mutual information approach, correlation integral analysis, false nearest neighbour algorithm, Lyapunov's exponent's analysis, and surrogate data method are used for comprehensive characterization. The correlation dimension method provided a low fractal-dimensional attractor thus suggesting a possibility of the existence of chaotic behaviour. Statistical significance of the results was confirmed by testing for a surrogate data.

A chaotic behaviour in the nitrogen dioxide concentration time series at several sites in the Gdansk and Odessa cities is numerically investigated. Different topological and dynamical invariants such as the Lyapunov's exponents, the Kaplan-Yorke dimension and Kolmogorov entropy and others are computed. It has been shown that an advanced computing has confirmed an existence of a low-D chaos in the cited system. For the first time new advanced approach is presented and applied to quite satisfactory short-terminal prediction of the atmospheric pollutant fluctuations dynamics.

Keywords: new mathematical models, new microsystem technologies, anthropogenic factor, atmospheric pollutants fluctuations, time series analysis and prediction

НОВИЙ ПІДХІД І МІКРОСИСТЕМНА ТЕХНОЛОГІЯ ВДОСКОНАЛЕНОГО АНАЛІЗУ І ПРОГНОЗУ ЧАСОВОЇ ДИНАМІКИ КОНЦЕНТРАЦІЙ ЗАБРУДНЮЮЧИХ РЕЧОВИН В АТМОСФЕРІ ПРОМИСЛОВИХ МІСТ

*Ю. Я. Бунякова¹, О. В. Глушков¹, О. Ю. Хецеліус¹, Г. В. Ігнатенко¹,
Н. Биковщенко², В. В. Буяджи¹*

¹Одеський державний екологічний університет, Львівська 15, Одеса, 65016

E-mail: buyadzhiyv@gmail.com

²Інститут Хімії та Охорони Довкілля, Технічний університет Щеціна,
вул. Piastów 42, 71-065, Щецін

Реферат

Мета роботи полягає у розробці та презентації нового підходу та, відповідно, нової мікросистемної технології для поглибленого, вдосконаленого аналізу, моделювання та прогнозування часової динаміки концентрацій забруднювачів повітря та застосування її до вивчення часової динаміки концентрації забруднюючих атмосферу речовин для конкретних індустріальних міст. В роботі представлені результати вдосконаленого аналізу, моделювання і прогнозування часової динаміки концентрацій забруднюючих речовин (двоокису азоту) в атмосфері промислових міст (Одеса, Україна, Гданськ, Польща) з використанням комплексу нових моделей і нової мікросистемної технології.

Застосовані методика нелінійного аналізу, теорія хаосу і методи теорії динамічних систем. Для аналізу вимірних часових періодів концентрацій діоксиду азоту фазовий простір системи було реконструйовано методом затримок. З метою виконання удосконаленого аналізу використовуються метод взаємної інформації, алгоритм кореляційного інтеграла, алгоритм помилкових найближчих сусідів, аналіз на основі показників Ляпунова і метод сурогатних даних. Метод кореляційної розмірності дозволив виявити дивний атрактор із відповідною фрактальною розмірністю. Статистична значимість результатів була підтверджена тестуванням сурогатних даних.

В рамках вдосконаленого підходу чисельно досліджена хаотична поведінка часових рядів концентрації двоокису азоту на декількох сайтах в містах Одеса (Україна) і Гданськ (Польща). Розраховані різноманітні топологічні та динамічні інваріанти, зокрема, показники Ляпунова, розмірності Каплана-Йорка, ентропія Колмогорова та інші. Вдосконалений підхід природно підтвердив існування детерміністичного хаосу в досліджуваній системі. Запропоновано новий ефективний метод коротко-і середньо-термінового прогнозування часової динаміки флуктуацій концентрацій забруднюючих атмосферу речовин на прикладі двоокису азоту.

Ключові слова: нові математичні моделі, нові мікросистемні технології, антропогенний вплив, флуктуації атмосферних забруднювачів, аналіз та прогнозування часових рядів

ДЕГРАДАЦІЯ, МЕТРОЛОГІЯ І СЕРТИФІКАЦІЯ СЕНСОРІВ

SENSOR'S DEGRADATION, METROLOGY AND CERTIFICATION

УДК 536.532

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.109115>

ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ОЦІНКИ СТАНУ ЕЛЕКТРОДІВ ТЕРМОПАР У ПРОЦЕСІ ЕКСПЛУАТАЦІЇ

О. Кочан

Науково-дослідний інститут «Інтелектуальних комп'ютерних систем» Тернопільського національного економічного університету, 46004, Майдан Перемоги 3, м. Тернопіль, Україна.
(0352) 43-6038.

Кафедра інформаційно-вимірювальних технологій Національного університету «Львівська політехніка», 79013, вул. С. Бандери 28А, м. Львів, Україна. (032)-258-26-19. orestvk@gmail.com

ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ОЦІНКИ СТАНУ ЕЛЕКТРОДІВ ТЕРМОПАР У ПРОЦЕСІ ЕКСПЛУАТАЦІЇ

О. Кочан

Анотація. У статті розглянуто причини виникнення похибок термоелектричних перетворювачів (ТЕП) викликаних деградаційними процесами у електродах термопар (ТП) – похибки від дрейфу функції перетворення і похибки від набутої у процесі експлуатації термоелектричної неоднорідності електродів ТП. Проаналізовано умови, в яких проявляються ці похибки, а також показано взаємозалежність між цими похибками і проаналізовано можливість визначення похибки ТЕП на місці експлуатації та бездемонтажного діагностування стану електродів ТП. Запропоновано міру деградації електродів ТП – еквівалентний час експлуатації.

Ключові слова: термоелектричний перетворювач, термопара, дрейф функції перетворення, набута неоднорідність термоелектродів, визначення похибки на місці експлуатації, діагностування стану електродів ТП, еквівалентний час експлуатації

THEORETICAL FUNDAMENTALS OF ESTIMATION OF THERMOCOUPLE LEG CONDITIONS DURING OPERATION

O. Kochan

Abstract. The causes of the thermocouple (TC) errors due to degradation processes in TC legs, such as the error due to drift of conversion characteristic and the error due to thermoelectric inhomogeneity of TC legs acquired during operation, are considered in this paper. The conditions under which these errors manifest themselves are analyzed. Also, the interdependence between these errors is shown as well as the opportunity of determining the error of a TC in situ and the nondestructive self-diagnosis of the state of TC legs during operation is considered. The measure of the degree of TC leg degradation such as the equivalent operating time is proposed in this paper.

Keywords: thermocouple, drift of conversion characteristics, acquired thermoelectric inhomogeneity, determination of error in situ, diagnosis of TC leg conditions, equivalent operating time

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ОЦЕНКИ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОДОВ ТЕРМОПАР В ПРОЦЕССЕ ЭКСПЛУАТАЦИИ

O. Kochan

Аннотация. В статье рассмотрены причины возникновения погрешностей термоэлектрических преобразователей вызванных деградационными процессами в электродах термопар – погрешности из-за дрейфа функции преобразования и погрешности из-за приобретенной в процессе эксплуатации термоэлектрической неоднородности электродов термопар. Проанализированы условия в которых эти погрешности появляются. Также показана взаимозависимость между этими погрешностями и проанализирована возможность определения погрешности термоэлектрического преобразователя на месте эксплуатации и бездемонтажного диагностирования состояния электродов термопар. Предложена мера степени деградации термопары – эквивалентное время эксплуатации.

Ключевые слова: термоэлектрический преобразователь, термопара, дрейф функции преобразования, приобретённая неоднородность термоэлектродов, определение погрешности на месте эксплуатации, диагностирование состояния электродов термопар, эквивалентное время эксплуатации.

Вступ

Незважаючи на ряд недоліків, термоелектричні перетворювачі (ТЕП), чутливим елементом яких є термопари (ТП), широко використовуються [1]. Одним із їх основних недоліків є деградація електродів ТП при дії високих температур у процесі експлуатації [2 - 4]. Деградація проявляє себе як похибка ТП від дрейфу функції перетворення (ФП) ТП (зміна ФП на протязі часу експлуатації ТП) або як похибка від набутої під час експлуатації термоелектричної неоднорідності електродів ТП (зміна генерованої термо-е.р.с. в умовах зміни профілю температурного поля при сталих температурах робочого і вільних кінців). У [5] показано, що максимальні похибки від дрейфу ФП ТП та від її набутої термоелектричної неоднорідності рівні. Ця властивість похибок ТП послужила теоретичною основою для розроблення методів визначення похибки ТП [6] та діагностування стану їх електродів [7] під час її експлуатації. Подальше вивчення взаємної залежності обох похибок дає змогу створити методи визначення еквівалентного часу експлуатації ТП.

Стан предметної області

За законом Зеебека [1], номінальну E_i^N та дійсну E_i^R термо-е.р.с. кожної ділянки електродів ТП можна визначити як

$$\begin{aligned} E_i^N &= e_N (T_{i+1} - T_i), \\ E_i &= (e_N + \Delta e_i) \cdot (T_{i+1} - T_i), \end{aligned} \quad (1)$$

де e_N , Δe_i – номінальна питома термо-е.р.с. (термоелектрична здатність) термоелектрода та її похибка; T_{i+1} , T_i – температури на кінцях ділянки термоелектрода.

Відхилення питомої термо-е.р.с. від номінальної Δe_i можна представити як суму початкового Δe_i^{POCH} та набутого у процесі експлуатації Δe_i^{NAB} відхилень, тобто $\Delta e_i = \Delta e_i^{POCH} + \Delta e_i^{NAB}$. Методи корекції початкового відхилення ТП Δe_i^{POCH} розглянуті у [8] та зводяться до визначення похибки ТП перед вводом у експлуатацію. При цьому ні дрейф ФП ТП, ані набута термоелектрична неоднорідність на похибку Δe_i^{POCH} не впливають – вони ще не встигли з'явитися.

рідність на похибку Δe_i^{POCH} не впливають – вони ще не встигли з'явитися.

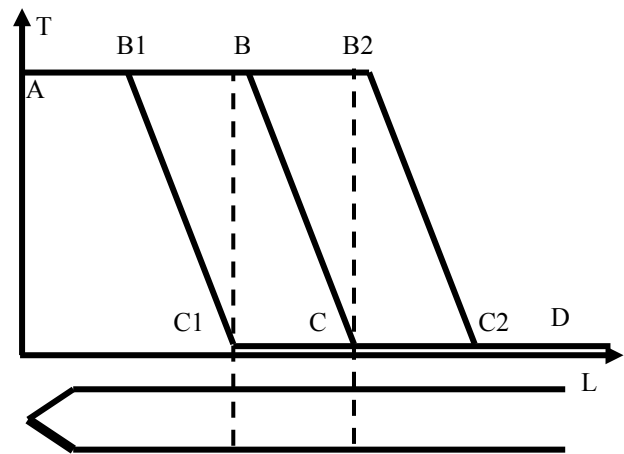


Рис. 1. Розміщення електродів ТП у різних профілях температурного поля.

На рис. 1 показано розміщення електродів ТП при експлуатації. Профіль постійної експлуатації позначено ABCD. Термо-е.р.с., генеровану ТП під час експлуатації, згідно (1), створюють ті її ділянки, що знаходяться у градієнта температури, тобто BC. Інші ділянки термо-е.р.с. не генерують. Деградація, як було показано у [2 - 4], приблизно пропорційна температурі, тому ті ділянки, що знаходяться у зоні АВ, деградує найбільше, а ті ділянки, що знаходяться у зоні CD, не деградує цілком. Але процеси деградації, що проходять у ділянках, які експлуатуються у зоні АВ, згідно (1), на термо-е.р.с. ТП (а значить і на її похибку) не впливають. У зоні BC кожна ділянка електродів ТП експлуатується при своїй температурі та деградує відповідно до цієї температури.

Якщо профіль температурного поля перевести до AB1C1D, то у зону градієнту B1C1 потраплять ділянки, що експлуатувалися при максимальній температурі та мають максимальні Δe_i^{NAB} . Якщо профіль температурного поля перенести у AB2C2D, то у зону градієнту B2C2 потраплять ділянки, що експлуатувалися при кімнатній температурі. Ці ділянки не деградували, для них $\Delta e_i^{NAB} \rightarrow 0$.

Тому, як було показано у [5], відхилення Δe_i^{NAB} при сталій вимірюваній температурі може проявляти себе як:

1. похибка дрейфу ФП ТП Δe_{TP}^{DR} , тобто зміна ФП в часі при сталому профілі температурного поля вздовж електродів ТП;

2. похибка Δe_{TP}^{NEOD} від набутої в процесі тривалої експлуатації термоелектричної неоднорідності електродів ТП – зміни генерованої термо-е.р.с. від зміни профілю температурного поля вздовж електродів при сталій температурі робочого та вільних кінців.

Методи корекції Δe_{TP}^{DR} узагальнено у [9] та розвинуто у [10]. Метод корекції Δe_{TP}^{NEOD} , запропонований у [11], має невисоку ефективність. Більш ефективний метод [12], що передбачає стабілізацію профілю температурного поля вздовж електродів ТП за допомогою додаткових підсистем регулювання температури. Тоді Δe_{TP}^{NEOD} не може себе проявити, тобто $\Delta e_{TP}^{NEOD} \rightarrow 0$. ТЕП, оснащений такими підсистемами регулювання температури, названо у [12] ТЕП з керованим профілем температурного поля (ТЕП з КПТП). Але метод [12] передбачає лише стабілізацію профілю температурного поля вздовж електродів ТП. Цілеспрямовані зміни профілю температурного поля дають можливість визначення похибки ТП [6] та діагностування стану її електродів [7] під час експлуатації. Однак для обґрунтування цих методів та оцінки їх похибок слід розвинути теоретичні основи термоелектричних явищ.

Метою даної статті є розвиток теоретичних основ використання властивостей похибок від дрейфу ФП ТП та від набутої термоелектричної неоднорідності для розроблення методу оцінки стану електродів ТП у процесі експлуатації.

Теоретичні основи взаємодії похибок термодар від дрейфу та від набутої термоелектричної неоднорідності

Якщо проаналізувати експериментальні дослідження процесу зростання похибки ТП при її деградації у процесі експлуатації [2 - 4], стає очевидним, що дрейф ФП ТП Δe_{TP}^{DR} та кожної її i -тої ділянки є функцією двох змінних – температури T_{Ei} та часу τ_{Ei} експлуатації, тоб-

то $\Delta e_i^{DR} = f(T_{Ei}, \tau_{Ei})$. А похибка від набутої термоелектричної неоднорідності Δe_i^{NEOD} проявляє себе лише при зміні профілю температурного поля, тому вона є функцією трьох змінних [5]

$$\Delta e_i^{NEOD} = f(T_{Ei}, \tau_{Ei}, \Delta T_{Di}), \quad (2)$$

де ΔT_{Di} – зміна температури ділянки до значення куди потрапила i -та ділянка термоелектрода після зміни профілю температурного поля.

Але у ТЕП з КПТП температури експлуатації та діапазону рівні, тобто $T_{Di} = T_{Ei}$, то $\Delta T_{Di} \rightarrow 0$ і похибка від набутої термоелектричної неоднорідності електродів ТП себе не проявляє, тобто $\Delta e_i^{NEOD} = 0$. У цьому полягає суть методу стабілізації профілю температурного поля [12]. У [5] показано, що похибки від дрейфу ФП ТП і від набутої термоелектричної неоднорідності електродів є наслідком однієї причини – деградації термоелектродів у процесі експлуатації. Тому між цими похибками існує тісний взаємозв'язок. А їх максимальні значення рівні, тобто $\Delta e_{MAX}^{DR} = \Delta e_{MAX}^{NEOD}$. Тому значення як Δe_i^{DR} так і Δe_i^{NEOD} характеризують стан i -тої ділянки термоелектрода, тобто ступінь її деградації. Через те, що похибка Δe_i^{NEOD} , згідно (2), є функцією трьох змінних, для її зображення необхідно побудувати чотиривимірний графік. Слід відзначити, що функція (2) мусить виконувати наступні умови

$$\Delta e_i^{NEOD} = 0 \left\{ T_{Ei} = 0, \tau_{Ei} = 0 \right. \quad (3)$$

Умови (3) означають, що, якщо ТП не експлуатувалася, то ніяких змін ФП її ділянок не відбувалося.

Для побудови графіка функції (2) по осі абсцис відкладемо температуру експлуатації ділянки T_{Ei} , по осі ординат – температуру діапазону T_{Di} , а по осі аплікату – значення похибки Δe_i^{NEOD} . Дискретним значенням часу експлуатації τ_{Ei} будуть відповідати поверхні, побудовані у вказаних координатах. Узагальнений графік залежності значення похибки Δe_i^{NEOD} ділянки ТП або ТП в цілому від T_{Ei} та T_{Di} для ряду часів експлуатації τ_{Ei} подано на

рис. 2. Кожному часу експлуатації τ_{Ei} відповідає інша поверхня.

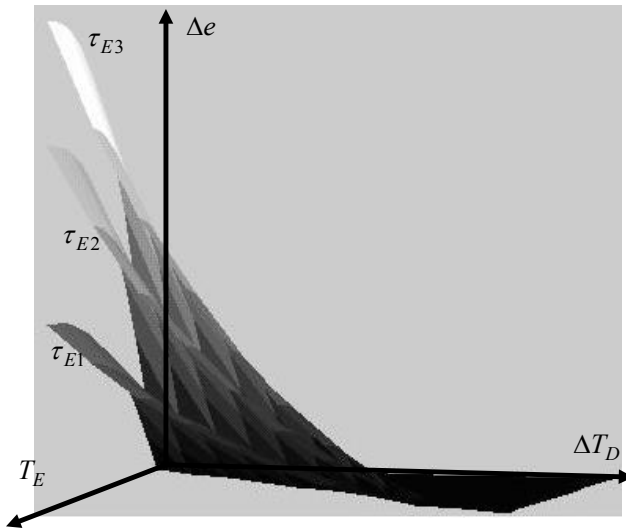


Рис. 2. Залежність похибки від набутої термоелектричної неоднорідності ділянки ТП від температури експлуатації, температури діапазону та фіксованих часів експлуатації.

Траєкторію дрейфу ФП ділянки ТП (або ФП ТП у цілому) у сталому профілі температурного поля можна відобразити на графіку рис. 2 як вертикальну пряму, що відповідає сталим координатам температури експлуатації T_{Ei} та температури діапазону T_{Di} , причому $T_{Ei} = T_{Di}$, а $\Delta T_{Di} = 0$. Тоді, для ТП в цілому, значення температури експлуатації T_E та температури діапазону T_D стають параметрами кривої, що є функцією однієї змінної – часу експлуатації τ_E . Якщо спроектувати вертикальну пряму дрейфу ФП ТП на площину, отримаємо одномірну функцію дрейфу ФП ТП, показану на рис. 3. Саму у такому режимі працює головна ТП у ТЕП з КПТП.

При зміні профілю температурного поля залежність зміни похибки Δe_{TP}^{NAB} від зміни температури діапазону ΔT_D для фіксованих температури T_E та часу τ_E експлуатації відповідає перерізу поверхні, що відповідає даному поточному часу експлуатації. Графік кривої, що відповідає цьому перерізу подано на рис. 4.

Як видно з рис. 2 і 4, до зміни профілю температурного поля, коли $\Delta T_D = 0$, похибка Δe_i^{NAB} проявляє себе лише як дрейф ФП ТП (точка Δe_{MAX}^{DR}). Коли змістити профіль температурного поля вліво (див. рис. 1, 2) до

AB2C2D, то у зону градієнту температури потраплять ділянки, що не експлуатувалися при високій температурі (постійно перебували при температурі вільних кінців), то очевидно, що тоді $\Delta e_i^{DR} = 0$. Для цього випадку $\Delta T_D \rightarrow \max$, а зміна термо-е.р.с. ТП буде визначатися похибкою від набутої термоелектричної неоднорідності Δe_i^{NEOD} . Подальше зміщення профілю температурного поля вліво (див. рис. 1, 2) вже не приведе до зміни термо-е.р.с. ТП (у зоні профілю температурного поля будуть і надалі перебувати ділянки ТП, що не деградували), а це означає, що похибка Δe_i^{NEOD} буде мати максимальне значення Δe_{MAX}^{NEOD} .

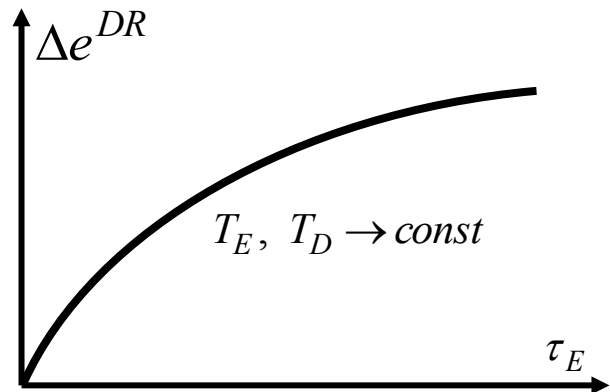


Рис. 3. Узагальнений графік залежності значення похибки дрейфу ФП ТП від часу експлуатації

Усі зміни поточної термо-е.р.с. ТП будуть проходити у межах однієї поверхні (див. рис. 2), яка відповідає поточному часу τ_E експлуатації ТП. Таким чином, як це видно з рис. 4, при зміні профілю температурного поля, проходить поступове витіснення поточної похибки дрейфу ФП ТП Δe_{POT}^{DR} похибкою від набутої термоелектричної неоднорідності Δe_{POT}^{NEOD} . Тобто можна записати

$$\Delta e_{MAX}^{DR} = \Delta e_{MAX}^{NEOD} = \Delta e_{POT}^{DR} + \Delta e_{POT}^{NEOD} \quad (4)$$

Слід відзначити, що залежність (4) є важливим розвитком висновку, зробленого у [5]. Вона підтверджує тісний зв'язок між похибками від дрейфу ФП ТП та від набутої термоелектричної неоднорідності як проявами од-

нієї причини – деградації термоелектродів. Ці прояви відрізняються умовами, при яких вони виникають. Але тісний зв'язок між похибками дає змогу розробити методи визначення похибки ТП [6] та діагностування стану їх електродів [7] під час її експлуатації.

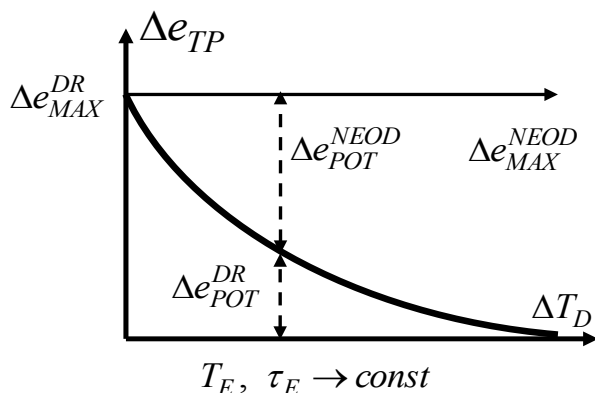


Рис. 4. Залежність похибки ТП від зміни температури діапазону.

Згідно рис. 4, для ТЕП з КПТП поточну похибку Δe_{POT}^{DR} його головної ТП (що вимірює температуру об'єкта) можна визначити тимчасово змістивши профіль температурного поля від ABCD до AB2C2D (див. рис. 1) та вимірявши зміну поточної термо-е.р.с ТП ΔE_{POT} . При цьому похибка Δe_{POT}^{NEOD} витіснить Δe_{POT}^{DR} . А Δe_{POT}^{NEOD} у свою чергу рівна ΔE_{POT} . Тому $\Delta e_{POT}^{DR} = \Delta E_{POT}$. У цьому і полягає суть методу [6] – основі періодичного визначення Δe_{POT}^{DR} у процесі експлуатації ТЕП з КПТП можна вести корекцію дрейфу ФП його головної ТП та забезпечити з високу точність вимірювання температури.

Однак метод визначення похибки ТП [6] не дає змоги під час експлуатації діагностувати стан її електродів по всій довжині. Слід зауважити, що індивідуальні особливості деградації має кожна ділянка ТП. Тому, для підвищення точності прогнозу похибки ТП, уже у [11] було запропоновано коригувати математичні моделі похибок ділянок за результатами визначення похибки ТП. Тоді математичні моделі похибок ділянок стають індивідуальними. Цього можна добитися при поступовій зміні профілю температурного поля. Але спочатку

необхідно визначити міру ступеня деградації електродів ТП.

Міра ступеня деградації ділянок електродів термопар

У загальному мірою ступеня деградації електродів ТП може бути одна з похибок – від дрейфу ФП ТП або від набутої термоелектричної неоднорідності. Але вони характеризують ТП у цілому. А у складних умовах експлуатації можлива пришвидшена деградація деяких ділянок електродів ТП. Крім того, згадані похибки не дають змогу прогнозувати вплив можливих змін профілю температурного поля на похибку вимірювання температури. Вибір як міри деградації електродів ТП температури експлуатації T_{Ei} їх ділянок теж не доцільний – вона не дає змоги врахувати індивідуальні особливості їх деградації.

Тому пропонується для оцінки ступеня деградації електродів ТП вибрати еквівалентний час її експлуатації τ_{EKV} . Він рівний фізичному часу τ_E експлуатації ТП, тобто $\tau_{EKV} = \tau_E$, якщо умови експлуатації близькі до умов експериментальних досліджень змін ФП однотипних ТП під дією основних впливаючих величин (температур експлуатації T_E та діапазону T_D , а також часу експлуатації τ_E). Однак при інших умовах експлуатації $\tau_{EKV} \neq \tau_E$. Якщо умови сприятливі, то $\tau_{EKV} < \tau_E$. Якщо умови жорсткі, то $\tau_{EKV} > \tau_E$. В загальному τ_{EKV} даної ТП повинен вказувати її місце у загальній математичній моделі змін ФП ТП, побудованій на базі результатів експериментальних досліджень, наприклад, [2 - 4]. Тоді τ_{EKV} є комплексною оцінкою стану електродів ТП. Якщо математична модель поєднує дію основних впливаючих величин, τ_{EKV} дає змогу оцінити похибки ТП, що можуть виникнути при її подальшій експлуатації, а також обґрунтувати рішення про доцільність або необхідність заміни ТП або ТЕП.

Метод визначення індивідуальних похибок ділянок електродів термопар у процесі експлуатації

У ТЕП з КПТП профіль температурного поля стабілізований, тому $T_{Ei} = T_{Di}$, а

$\Delta T_{Di} \rightarrow 0$ (тому $\Delta e_{POT}^{NEOD} \rightarrow 0$, тобто набула термоелектрична неоднорідність не може себе проявити). Якщо перемістити профіль температурного поля максимально вліво (у профіль АВ2С2D, див. рис. 1), то $T_{Di} \rightarrow 0$ (точніше до температури вільних кінців). Тоді $\Delta T_{Di} = T_{Ei}$,

а $\Delta e_{POT}^{NEOD} \rightarrow \Delta e_{MAX}^{NEOD}$ згідно (4) та рис. 4. Це означає, що Δe_i^{NEOD} повністю витіснить Δe_i^{DR} . Тоді, згідно (4), можна визначити сумарну похибку дрейфу ФП всіх ділянок головної ТП Δe_{Σ}^{DR} за зміною генерованої ТП термо-е.р.с., яка рівна Δe_{Σ}^{NEOD} .

Однак, якщо перемістити профіль температурного поля вліво (див. рис. 1) у проміжне положення між профілями АВCD та АВ2С2D, то змінюються температури діапазону T_{Di} для всіх ділянок. Але, на відміну від попереднього варіанту, $0 < T_{Di} < T_{Ei}$. Тоді $\Delta T_{Di} \neq T_{Ei}$, а $\Delta e_{POT}^{NEOD} \neq \Delta e_{MAX}^{NEOD}$, тобто Δe_i^{NEOD} не повністю витіснить Δe_i^{DR} .

У такому випадку діє залежність (4). Цей стан ілюструє рис. 5, де показано процес неповного витіснення. Рис. 5 побудовано аналогічно до рис. 4. У рис. 5 прийнято, що профіль температурного поля поступово пересувається вправо (див. рис. 1) кожен раз на одну ділянку. Кожна наступна зміна профілю температурного поля ΔT_{Di} виводить чергову ділянку у зону рівномірного профілю температурного поля АВ (див. рис. 1). Така ділянка перестає, згідно (1), генерувати термо-е.р.с., тому її похибка зникає – вона перестає входити у вимірювану сумарну зміну термо-е.р.с. ТП. Це показано на рис. 5 як зміну нижнього індексу суми. При початковому профілі температурного поля ТЕП з КПТП (профілі експлуатації АВCD) у термо-е.р.с. ТП входять похибки всіх ділянок, на які розбита зона ВС (див. рис. 1) головної ТП, тобто $i = \overline{1, k}$. Після першої зміни профілю температурного поля перша ділянка потрапляє у рівномірний профіль температурного поля, тобто температуру, що відповідає зоні АВ (див. рис. 1). Ця ділянка ТП, згідно (1) перестає генерувати термо-е.р.с., тому індекси наступної суми її не враховують, тобто $i = \overline{2, k}$. При наступних змінах профілю

температурного поля наступні ділянки перестають генерувати термо-е.р.с., що враховують індекси наступних сум. В кінці залишається похибка останньої, k -тої ділянки. Подальше пересування профілю температурного поля втрачає зміст – у зону градієнту потрапляють лише ділянки, які експлуатувалися при температурі вільних кінців, тобто не деградували.

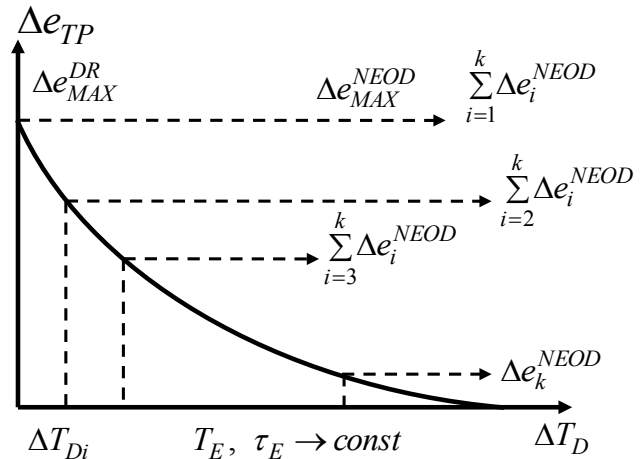


Рис. 5. Графік залежності значення похибки ділянок ТП, що входять у склад ТЕП з КПТП.

Детальніше зміни профілю температурного поля ділянок при пропонованому методі діагностування стану електродів ТП показано на рис. 6. Для спрощення на рис. 6 зміни профілю температурного поля ΔT_{Dj} чітко відповідають k ділянкам, на які розбита ТП. На рис. 6 позначено температури експлуатації окремих ділянок $T_{E1}, T_{E2}, \dots, T_{Ek+1}$ та похибки дрейфу ФП ділянок $\Delta e_1^{DR}, \Delta e_2^{DR}, \dots, \Delta e_{k+1}^{DR}$, що цим температурам відповідають. Нижче за $T_{E1}, T_{E2}, \dots, T_{Ek+1}$ показано зміни температури діапазону $\Delta T_{D1}, \Delta T_{D2}, \dots, \Delta T_{Dk}$, куди потраплять ділянки після змін профілю температурного поля. При цьому прийнято, що

$$\begin{aligned} T_{E1} - T_{E2} &= \Delta T_{D1}, \quad T_{E2} - T_{E3} = \\ &= \Delta T_{D2}, \quad \dots, \quad T_{Ek} - T_{Ek+1} = \Delta T_{Dk}. \end{aligned} \quad (5)$$

Зверху рис. 6 показані також відповідні похибки від набутої термоелектричної неоднорідності.

рідності ділянок ТП $\Delta e_1^{NEOD}, \Delta e_2^{NEOD}, \dots, \Delta e_k^{NEOD}$ для окремих ділянок. Кожна з похибок від набутої термоелектричної неоднорідності відповідає своїй зміні температури діапазону $\Delta T_{D1}, \Delta T_{D2}, \dots, \Delta T_{Dk}$.

Як видно з рис. 6, виміряна термо-е.р.с. одночасно містить похибки всіх ділянок, що потрапляють у зону градієнту профілю температурного поля (див. рис. 1). Тому сумарну термо-е.р.с. E_{Σ}^{PROF1} для першого (прилегло до точки В) профілю температурного поля можна визначити як суму термо-е.р.с. окремих ділянок E_i^{PROF1}

$$E_{\Sigma}^{PROF1} = \sum_{i=1}^k E_i^{PROF1} \quad (6)$$

При цьому термо-е.р.с. кожної ділянки у деякому профілі температурного поля можна визначити як

$$E_i^{PROF} = (e_i + \Delta e_i) \cdot (T_{Ei} - T_{Di}) = (e_i + \Delta e_i) \cdot (T_{Ei} - T_{Ei+1}) = e_i \cdot (T_{Ei} - T_{Ei+1}) + \Delta e_i \cdot (T_{Ei} - T_{Ei+1}) = E_i^{NOM} + \Delta e_i^{NEOD} \quad (7)$$

Як було вказано, при переміщенні профілю температурного поля від профілю ABCD до профілю AB2C2D (див. рис. 1), ділянки, які у даний момент знаходяться справа від поточного профілю температурного поля потрапляють у рівномірне температурне поле АВі. Тому для цих ділянок $(T_{Ei} - T_{Ei+1}) \rightarrow 0$, тобто, згідно (7), для цих ділянок $E_i^{PROF1} \rightarrow 0$. Для ділянок, які експлуатувалися при температурі вільних кінців (у зоні CD профілю температурного поля ABCD) $\Delta e_i = 0$. Тому всі ці ділянки не змінюють термо-е.р.с. ТП під час переміщення профілю температурного поля від T_{E1} до T_{Ek+1} . Таким чином, на основі (6) і (7), можна скласти рівняння, яке буде відображати результат вимірювання термо-е.р.с. ТП E_i^{VYM} при поступовій зміні профілю температурного поля згідно рис. 6

$$E_{\Sigma}^{PROFi} = \sum_i^k (E_i^{NOM} + \Delta e_i^{NEOD}) = E_i^{VYM} \quad (8)$$

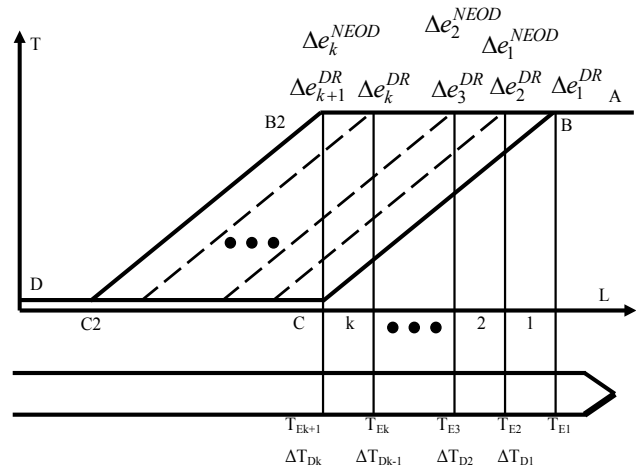


Рис. 6. Профілі температурного поля при діагностуванні термоелектродів.

На основі (8) можна скласти систему рівнянь, яка буде об'єднувати результати вимірювань на протязі всього процесу переміщення профілю температурного поля з профілю ABCD у профіль AB2C2D (див. рис. 1), тобто процес діагностування термоелектродів головної ТП, що входить у ТЕП з КПТП

Систему рівнянь (9) можна переписати у матричній формі

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^k (E_i^{NOM} + \Delta e_i^{NEOD}) = E_1^{VYM} \\ \sum_{i=2}^k (E_i^{NOM} + \Delta e_i^{NEOD}) = E_2^{VYM} \\ \dots \\ \sum_{i=k}^k (E_i^{NOM} + \Delta e_i^{NEOD}) = E_k^{VYM} \end{cases} \quad (9)$$

Таку систему дуже зручно рішати методом Гауса.

$$\begin{pmatrix} E_1^{NOM} + \Delta e_1^{NEOD} & E_2^{NOM} + \Delta e_2^{NEOD} & E_3^{NOM} + \Delta e_3^{NEOD} & \dots & E_k^{NOM} + \Delta e_k^{NEOD} & E_1^{VYM} \\ 0 & E_2^{NOM} + \Delta e_2^{NEOD} & E_3^{NOM} + \Delta e_3^{NEOD} & \dots & E_k^{NOM} + \Delta e_k^{NEOD} & E_2^{VYM} \\ 0 & 0 & E_3^{NOM} + \Delta e_3^{NEOD} & \dots & E_k^{NOM} + \Delta e_k^{NEOD} & E_3^{VYM} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & E_k^{NOM} + \Delta e_k^{NEOD} & E_k^{VYM} \end{pmatrix}$$

У результаті рішення систем рівнянь (9) або (10) отримаємо дійсні поточні значення похибки від набутої термоелектричної неоднорідності окремих ділянок ТП $\Delta e_1^{NEOD}, \Delta e_2^{NEOD}, \dots, \Delta e_k^{NEOD}$. Як видно з рис. 6, максимальна зміна профілю температурного поля переводить всі ділянки ТП, що експлу-

тувалися при високих температурах, у зону рівномірного температурного поля, тобто вони перестають генерувати термо-е.р.с. У такому випадку похибка від набутої термоелектричної неоднорідності сягає максимального значення. Однак, згідно (4), максимальні значення похибок від дрейфу ФП ТП та від набутої термоелектричної неоднорідності рівні. Таким чином, згідно (4), за результатами розрахунку Δe_1^{NEOD} , Δe_2^{NEOD} , ... Δe_k^{NEOD} можна розрахувати поточні значення похибок від дрейфу ФП для всіх ділянок ТП Δe_1^{DR} , Δe_2^{DR} , ... Δe_k^{DR} . Ці значення можна безпосередньо використати для корекції математичних моделей похибок, викликаних індивідуальним характером деградації всіх ділянок електродів ТП.

Метод визначення еквівалентного часу експлуатації ділянок електродів термопар у процесі експлуатації

Для знаходження еквівалентного часу експлуатації τ_{EKV} головної ТП, що входить у склад ТЕП з КПТП, спочатку визначаємо описаним вище методом максимальне значення похибки від набутої термоелектричної неоднорідності Δe_{MAX}^{NEOD} , потім, згідно (4), обчислюємо похибку від дрейфу ФП ТП Δe_{MAX}^{DR} . Далі, за допомогою математичної моделі дрейфу ФП ТП обчислюємо прогнозовану похибку Δe_{MM}^{DR} для фізичного часу експлуатації τ_E . Коефіцієнт K_{MM} , що відображає невідповідність математичної моделі похибки ТП реальній деградації електродів, та еквівалентний час експлуатації τ_{EKV} знаходимо за формулами

$$K_{MM} = \Delta e_{MAX}^{DR} / \Delta e_{MM}^{DR}, \quad \tau_{EKV} = K_{MM} \cdot \tau_E. \quad (11)$$

Еквівалентний час експлуатації τ_{EKVi} ділянок головної ТП знаходимо аналогічно. Шляхом рішення системи рівнянь (9) або (10) знаходимо похибки неоднорідності Δe_{MAXi}^{NEOD} всіх ділянок електродів ТП, потім згідно (4) їх похибки від дрейфу ФП ТП Δe_{MAXi}^{DR} . Далі, за допомогою математичної моделі дрейфу ФП ТП обчислюємо прогнозовані похибки ділянок Δe_{MMi}^{DR} для фізичного часу експлуатації τ_E . Коефіцієнти K_{MMi} та еквівалентні часи ек-

сплуатації ділянок τ_{EKVi} знаходимо згідно (11). Значення K_{MMi} або τ_{EKVi} можна використовувати для врахування індивідуальних особливостей деградації ділянок ТП.

Висновки

Проведені теоретичні дослідження дали змогу обґрунтувати можливість використання властивостей похибок ТП від дрейфу її ФП та від набутої термоелектричної неоднорідності як основи для розроблення бездемонтажних методів визначення похибки ТП та оцінки стану її термоелектродів безпосередньо у процесі експлуатації. Метод визначення похибки ТП дає змогу створювати індивідуальні моделі похибки ТП в цілому та підвищити точність корекції її похибки в умовах сталого профілю температурного поля, формованого ТЕП з КПТП. Метод оцінки стану електродів ТП дає змогу обґрунтовано вирішити питання про доцільність або необхідність заміни ТП або ТЕП у цілому. Крім того, цей метод дає змогу оцінити не лише похибку ТП в цілому, а і визначити похибки окремих її ділянок. Це у свою чергу, дає змогу створювати індивідуальні моделі похибок окремих ділянок ТП та підвищити точність корекції її похибки за методом, запропонованим у [11], тобто в умовах змін профілю температурного поля.

Список використаної літератури

- [1]. Entsyklopediya termometriyi / Ya.Lutsyk, L. Bunyak, Yu. Rudavs'kyu, B. Stadnyk. – L'viv: NU «L'vivs'ka politehnika», 2003. – 428 s. (in Ukrainian).
- [2]. Rogelberg I. Izmeneniya termoelektricheskoy sily provolok iz khromelya i alyumelya pri nagreve na vozdukh pri 800°S prodolzhitelnostyu do 10000 ch. Tom III. / Rogelberg I., Pigidina N., Pokrovskaya G. i dr. – Sb. Issledovaniye splavov dlya termopar. – Trudy instituta Giprotsvetmetobrabotka. – Moskva: Metallurgiya. 1969. (in Russian).
- [3]. Datchiki dlya izmereniya temperatury v promyshlennosti / G.V.Samsonov, A.I.Kits, O.A.Kyuzdeni i dr. – Kiev.: Naukova dumka, 1972. – 223 s. (in Russian).
- [4]. Kortvelyessy L. Thermoelement Praxis /

- Kortvelyessy L. – Vulkan-Verlag, Essen, 1981. S. – 498.
- [5]. Kochan O.V. Otsinka maksimal'noyi pokhybky neodnorodnykh termopar / O.V. Kochan, R.V. Kochan, V.Ya. Yaskilka, N.M. Vasyl'kiv // Visnyk Ternopil's'koho Derzhavnogo Tekhnichnogo Universytetu. – 2007. – N. 1 - S. 122-129. (in Ukrainian).
- [6]. Pat. 102981 Ukrayina, MPK G01K 7/02. Sposib korektsiyi pokhybky holovnoyi termopary / O.V.Kochan, R.V.Kochan; vlasnyk zayavnyky. N a201213268; zayavl. 21.11.2012; opublik. 10.08.13, Byul. N 16. (in Ukrainian).
- [7]. Pat. 104952 Ukrayina, MPK G01K 13/00. Sposib samodiahnostyky termopar na misti ekspluatatsiyi ta prystryi dlya yoho realizatsiyi / O.V.Kochan; vlasnyk zayavnyk. N a201213269; zayavl. 21.11.2012, opublik. 27.08.13, byul. N 16 (in Ukrainian).
- [8]. Sachenko A.A. Sovershenstvovaniye metodov izmereniya temperatury / A.A. Sachenko. E.Ya. Tverdyy. – K.: Tekhnika. 1983. – 104 s. (in Russian).
- [9]. Sachenko A.A. Razrabotka metodov povysheniya tochnosti i sozdaniye sistem pretsizionnogo izmereniya temperatury dlya promyshlennykh tekhnologiy: dis. doktora tekhn. nauk : 05.11.16 / Sachenko Anatoliy Alekseyevich. – Leningrad. 1988. – 278 s. (in Russian).
- [10]. Turchenko V.O. Neyromerezhevi metody i zasoby pidvyshchennya efektyvnosti dystrybutyvnykh merezh zboru ta obrobky sensorykh danykh: avtoref. dys. na zdotuttya nauk. stupenya kand. tekhn. nauk: spets. 05.13.13 «Obchyslyval'ni mashyny, systemy, merezhi» / V.O. Turchenko. – L'viv, 2001. – 16 s. (in Ukrainian).
- [11]. Vasyl'kiv N.M. Pidvyshchennya tochnosti vymiryuvannya temperatury termoparamy v protsesi ekspluatatsiyi: dysertatsiya na zdotuttya nauk. stupenya kand. tekhn. nauk: spets. 05.11.04 «Prylady ta metody vymiryuvannya teplovykh velychyn»/ N.M. Vasyl'kiv - L'viv, 2010. – 158 s. (in Ukrainian).
- [12]. Pat. 97464 Ukrayina, MPK G01K 15/00. Termoelektrychnyy peretvoryuvach / Kochan O.V., Kochan R.V. - zayavl. 22.02.2007. (in Ukrainian).

Стаття надійшла до редакції 28.08.2017 р.

UDC 536.532

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.109115>

THEORETICAL FUNDAMENTALS OF ESTIMATION OF THERMOCOUPLE LEG CONDITIONS DURING OPERATION

O. Kochan

Research Institute of Intelligent Information Systems of Ternopil National Economic University, 46004, 3 Peremoha Square, Ternopil, Ukraine, (0352) 43-6038.

Department of measuring information technologies at Lviv polytechnic national university, 79013, S. Bandera str. 28A, Lviv, Ukraine. (032)-258-26-19. orestvk@gmail.com

Summary

The goal of this paper is to develop the theoretical basis for the use of the properties of errors due to drift of thermocouple (TC) conversion characteristic (CC) and due to acquired during operation thermoelectric inhomogeneity of TC legs to develop the method for evaluating the state of TC legs during operation. The paper considers the influence of degradation processes in TC legs on the appearance of

the error due to drift and the error due to inhomogeneity. The conditions in which these errors manifest themselves are analyzed. This makes it possible to determine the variables on which these errors depend. It is shown that the error due to drift manifests itself as a change in the emf developed by the TC with time in unchanged operating conditions. Thus, this error is a function of time. The error due to inhomogeneity manifests itself when the temperature field along TC legs changes even at constant temperatures of the measuring and reference junctions. Thus, this error is a function of the operating temperature, operating time and the instantaneous temperature at which a certain measurement is carried out. The paper reveals the interdependence between these errors and investigates the process of gradual substitution of the error due to drift by the error due to inhomogeneity. The theoretical basis of the interaction of the TC errors due to drift and due to inhomogeneity studied to create the methods for determining the error of TCs in situ and diagnosing the state of TC legs during operation. On the basis of the studies carried out in this paper, the method of determination of the errors of individual sections of TC legs during operation is suggested. There is proposed the measure of degradation of TC legs. This measure is the equivalent operating time. The method of determination of the equivalent operating time for TC sections during operation is proposed.

Keywords: thermocouple, drift of conversion characteristics, acquired thermoelectric inhomogeneity, determination of error in situ, diagnosis of TC leg conditions, equivalent operating time

УДК 536.532

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.3.109115>

ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ОЦІНКИ СТАНУ ЕЛЕКТРОДІВ ТЕРМОПАР У ПРОЦЕСІ ЕКСПЛУАТАЦІЇ

О. Кочан

Науково-дослідний інститут «Інтелектуальних комп'ютерних систем» Тернопільського національного економічного університету.

Кафедра інформаційно-вимірювальних технологій Національного університету «Львівська політехніка».

Реферат

Метою даної статті є розвиток теоретичних основ використання властивостей похибок від дрейфу функції перетворення (ФП) термопари (ТП) та від набутої термоелектричної неоднорідності для розроблення методу оцінки стану електродів ТП у процесі експлуатації. У статті розглянуто вплив деградаційних процесів у електродах ТП на появу похибки від дрейфу функції перетворення і похибки від набутої у процесі експлуатації термоелектричної неоднорідності електродів ТП. Проаналізовано умови, в яких проявляються ці похибки. Це дало змогу визначити величин від впливу яких залежать ці похибки. Показано, що похибка від дрейфу функції перетворення проявляється як зміна генерованої термопарою е.р.с. в часі у незмінних умовах експлуатації. Тобто ця похибка є функцією часу. Похибка від набутої у процесі експлуатації неоднорідності проявляється при змінах температурного поля вздовж електродів ТП навіть при постійних температурах робочого та вільних кінців. Таким чином ця похибка є функцією температури експлуатації, часу експлуатації і поточної температури, при якій проводиться вимі-

рювання. А також показано взаємозалежність між цими похибками і досліджено процес поступового витіснення похибки від дрейфу похибкою від неоднорідності. Досліджено теоретичні основи взаємодії похибок термопар від дрейфу та від набутої термоелектричної неоднорідності для створення методів визначення похибки ТЕР на місці експлуатації та бездемонтажного діагностування стану електродів ТП. На базі проведених у статті досліджень запропоновано метод визначення індивідуальних похибок ділянок електродів термопар у процесі експлуатації. Запропоновано міру деградації електродів ТП – еквівалентний час експлуатації. Запропоновано метод визначення еквівалентного часу експлуатації ділянок електродів термопар у процесі експлуатації.

Ключові слова: термоелектричний перетворювач, термопара, дрейф функції перетворення, набута неоднорідність термоелектродів, визначення похибки на місці експлуатації, діагностування стану електродів ТП, еквівалентний час експлуатації

Р І Ш Е Н Н Я
Міжнародної конференції
з інформаційно-телекомунікаційних
технологій та радіоелектроніки
(UkrMiKo'2017/UkrMiCo'2017)

З 12 по 15 вересня 2017 р. на базі Одеської Національної академії зв'язку імені О. С. Попова відбулася **Міжнародна конференція з інформаційно-телекомунікаційних технологій та радіоелектроніки (UkrMiKo'2017/UkrMiCo'2017)**.

Організаторами конференції є IEEE Ukraine Section (Kharkiv) SP/AP/C/EMC/COM Societies Joint Chapter, IEEE Ukraine Section (Kyiv) ED/MTT/CPMT/SSCS/COM Societies Joint Chapter, Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Одеська Національна академія зв'язку імені О.С.Попова за участі Міністерства освіти і науки України, Національної академії наук України, провідних університетів України та інноваційних партнерів.

На пленарному і чотирьох секційних засіданнях заслухали 110 доповідей зі 127 допущених (87%), які відображують досягнення 25 університетів та наукових установ України, 15 наукових та освітніх закладів Білорусі, Молдови, Азербайджану, Латвії, Великобританії, Ізраїлю, Німеччини, Польщі, Данії, Португалії.

80 доповідей (73%) виголошено англійською мовою, решта - державною мовою.

56 доповідей з виголошених (51%) мають зв'язок з тематикою НДР, що фінансуються з бюджету, ще 8 - з тематикою НДР, що фінансуються за госпдоговорами.

Конференція реалізувала деякі особливості в організації її проведення.

По-перше, вона підтвердила статус базової конференції Наукової ради Міністерства освіти і науки України, що, зокрема, оцінювала доповіді, які віддзеркалюють зміст держбюджетної наукової тематики університетів України.

До Керівного комітету конференції ввійшли 8 членів Секції № 5 «Електроніка, радіотехніка та телекомунікації» Наукової ради МОН України.

14 із 24 членів Секції є авторами та співавторами доповідей на Конференції.

По-друге, оцінку наукового рівня робіт здійснювали члени секції № 5 та інших секцій Наукової ради міністерства, які ввійшли до складу Програмного комітету і були учасниками пленарних і секційних засідань конференції.

До складу Програмного комітету ввійшли представники 14 національних університетів України, 4 академічних установ, 22 іноземних наукових центрів, зокрема, Варшавська політехніка (Польща), ДУ «Люблінська політехніка» (Польща), Дрезденський технічний університет, Університет Ерлангена-Нюрнберга (Німеччина), Ризький технічний університет (Латвія), Ієрусалімський Ben-Gurion University (Ізраїль) та інші.

До Програмного комітету всього надійшло 150 доповідей, з яких 82 % – англійськомовних, 12 % - українськомовних, 6 % – російськомовних.

До Програми конференції після рецензування було включено 110 (87%) доповідей, розподілених за 4 напрямками.

Загалом свої доповіді надіслали представники 40 установ, серед яких – 25 ВНЗ та наукових установ України, 15 наукових установ та університетів Великобританії, Німеччини, Швейцарії, Польщі, Ізраїлю, Білорусі та інших країн.

Найбільшу кількість доповідей надіслали КПІ ім. Ігоря Сікорського (33 доповіді), Одеська Національна академія зв'язку імені О. С. Попова (23 доповіді), НУ «Львівська політехніка» (12 доповідей).

Значна частка доповідей університетських науковців відповідають тематиці держбюджетних НДР (а саме, 56 з 110 виголошених, тобто 51 %), а від установ НАН України – тематиці Відділення інформатики НАН України.

По-третє, конференція отримала статус зареєстрованої в системі конференцій IEEE, тому має можливість розмістити матеріали відібраних доповідей в електронному ресурсі IEEE Xplore Digital Library, який індексується у наукометричних базах даних (Scopus, Web of Science, Google Scholar та ін.).

По-четверте, у конференції взяли участь представники профільних підприємств та інноваційно орієнтованих інформаційно-теле-

комунікаційних компаній, що має сприяти поглибленню співпраці університетів і наукових установ з промисловістю та бізнесом.

Зокрема, серед партнерів-організаторів Конференції компанії «Nokia-Ukraine»; «Lifecell»; ТОВ «Телекарт-Прилад».

На підставі розгляду виголошених доповідей, пропозицій Програмного комітету, його співголів за напрямками роботи конференції, головуючих на засіданнях секцій

Конференція приймає **рішення:**

1. Вважати **Міжнародну конференцію з інформаційно-телекомунікаційних технологій та радіоелектроніки (УкрМіКо'2017)** такою, що відбулася як базова конференція Наукової ради Міністерства освіти і науки України за напрямом «Електроніка, радіотехніка та телекомунікації», яка спрямована, в тому числі, на оцінки доповідей, що віддзеркалюють зміст держбюджетної наукової тематики ВНЗ України.

2. Відзначити позитивний внесок в організацію конференції та в процедуру залучення конференції в структуру IEEE Українського відділення IEEE (керівник проф. Яновський Ф.Й., Київ, Україна), а також регіональних представників з боку Київської філії Українського відділення IEEE (керівник Іванько К.М., Київ, Україна) та Харківської філії Українського відділення IEEE - IEEE Kharkiv Chapter (голова Антіфєєва М.С., Харків, Україна).

3. Відзначити значну кількість доповідей, які відповідають змісту держбюджетної наукової тематики ВНЗ України за напрямками роботи Секції № 5 «Електроніка, радіотехніка та телекомунікації» Наукової ради МОН України, та врахувати їх науковий рівень при проведенні наукової експертизи на етапах завершення та рекомендацій до відкриття нових відповідних НДР.

4. Рекомендувати наведені в Додатку 1 доповіді, які висвітлюють нові, раніше не опубліковані наукові дослідження, виголошені на Конференції та рекомендовані відповідними секціями для розміщення в електронному ресурсі IEEE Xplore Digital Library (відп. Глоба Л. С.).

Термін подання матеріалів для розміщення в базі IEEE – до 10.10.2017 р.

5. Рекомендувати наведені в додатку 2 доповіді, які виголошені на Конференції та рекомендовані відповідними секціями, для розміщення у вітчизняних фахових наукових виданнях, зокрема в міжнародних журналах «Information & Telecommunication Sciences» (КПІ ім. Ігоря Сікорського), «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології» (ОНУ імені І. І. Мечникова) та інших виданнях (відп. Уривський Л. О.).

Термін подання матеріалів до редакцій – до 10.10.2017 р.

6. Доповіді, подані до Програмного комітету конференції та прийняті до участі в Конференції, розмістити в Збірнику матеріалів конференції (УкрМіКо'2017/UkrMiCo'2017). (Відп. Уривський Л. О.).

Термін підготовки Збірника до публікації - до 10.12.2017 р.

7. Розглянути підсумки роботи Конференції УкрМіКо'2017 на черговому засіданні Секції № 5 «Електроніка, радіотехніка та телекомунікації» Наукової ради МОН України.

8. Рекомендувати спеціалізованим вченим радам ВНЗ, які працюють за науковим напрямом 17 «Електроніка та телекомунікації», вважати доцільною підтримку здобувачів наукового ступеня доктора філософії, що брали участь в роботі науково-технічних конференцій під егідою IEEE, зокрема Міжнародної конференції з інформаційно-телекомунікаційних технологій та радіоелектроніки (УкрМіКо).

9. Інформацію про результати проведення конференції, посилання на публікації та Збірник матеріалів розмістити на сайті Конференції УкрМіКо'2017 (відп. Созоник Г. Д.).

Термін розміщення матеріалів про результати проведення конференції - до 20.09.2017 р.

Термін розміщення посилань на публікації та матеріалів Збірника матеріалів конференції - до 31.12.2017 р.

10. Висловити подяку всім членам Керівного, Організаційного, Програмного та Виконавчого комітетів як організаторів Конференції. Окремо подякувати ректору Одеської національної академії зв'язку ім.О. С. Попова проф. Воробієнку П. П. та представникам Академії за значну та успішну роботу щодо організації прийому учасни-

ків конференції та проведення пленарних і секційних засідань.

11. Організацію та проведення наступної **Міжнародної конференції з інформаційно-телекомунікаційних технологій та радіоелектроніки (УкрМіКо'2018/UkrMiCo'2018)** доручити діючому Керівному комітету.

Рекомендувати Керівному комітету внести відповідну корекцію складу Програмного комітету відповідно до вимог IEEE та з урахуванням досвіду організації УкрМіКо'2017.

Рекомендувати Програмному комітету Конференції УкрМіКо'2018 змінити порядок на-

йменування секцій відповідно до назви конференції, а саме:

Section 1. Infocommunications

Section 2. Telecommunications

Section 3. Radio Engineering

Section 4. Electronics

12. Місце проведення наступної конференції УкрМіКо'2018 визначити після відповідних консультацій з керівниками університетів-співорганізаторів конференції.

Рішення схвалено на Пленарному засіданні Конференції **УкрМіКо'2017** 15.09.2017 р.

ІНФОРМАЦІЯ ДЛЯ АВТОРІВ. ВИМОГИ ДО ОФОРМЛЕННЯ СТАТЕЙ У ЖУРНАЛ

Журнал «Сенсорна електроніка і мікросистемні технології» публікує статті, короткі повідомлення, листи до Редакції, а також коментарі, що містять результати фундаментальних і прикладних досліджень, за наступними напрямками:

1. Фізичні, хімічні та інші явища, на основі яких можуть бути створені сенсори
2. Проектування і математичне моделювання сенсорів
3. Сенсори фізичних величин
4. Оптичні, оптоелектронні і радіаційні сенсори
5. Акустoeлектронні сенсори
6. Хімічні сенсори
7. Біосенсори
8. Наносенсори (фізика, матеріали, технологія)
9. Матеріали для сенсорів
10. Технологія виробництва сенсорів
11. Сенсори та інформаційні системи
12. Мікросистемні та нанотехнології (MST, LIGA-технологія та ін.)
13. Деградація, метрологія і сертифікація сенсорів

Журнал публікує також замовлені огляди з актуальних питань, що відповідають його тематиці, поточну інформацію — хроніку, персоналії, платні рекламні повідомлення, оголошення щодо конференцій.

Основний текст статті повинен відповідати вимогам Постанови Президії ВАК України від 15.01.2003 р. №7-05/1 (Бюлетень ВАК України 1, 2003 р.) і бути структурованим. Матеріали, що надсилаються до Редакції, повинні бути написані з максимальною ясністю і чіткістю викладу тексту. У поданому рукописі повинна бути обґрунтована актуальність розв'язуваної задачі, сформульована мета дослідження, міститися оригінальна частина і висновки, що забезпечують розуміння суті отриманих результатів і їх новизну. Автори повинні уникати необґрунтованого введення нових термінів і вузькопрофільних жаргонних висловів.

Редакція журналу просить авторів при направленні статей до друку керуватися наступними правилами:

1. Рукописи повинні надсилатися у двох примірниках українською, або російською, або англійською мовою і супроводжуватися файлами тексту і малюнків на CD. Рукописи, які пропонуються авторами з України або країн СНД до видання англійською мовою обов'язково доповнюються україномовною або російськомовною версією. Електронна копія може бути надіслана електронною поштою.

2. Прийнятні формати тексту: MS Word (rtf, doc).

3. Прийнятні графічні формати для рисунків: EPS, TIFF, BMP, PCX, WMF, MS Word і MS Graf, JPEG. Рисунки створені за допомогою програмного забезпечення для математичних і статистичних обчислень, повинні бути перетворені до одного з цих форматів.

4. На статті авторів з України мають бути експертні висновки про можливість відкритого друку.

Рукописи надсилати за адресою:

Лепіх Ярослав Ілліч, Заст. гол. редактора,
Одеський національний університет імені І. І. Мечникова, МННФТЦ (НДЛ-3),
вул. Дворянська, 2, Одеса, 65082, Україна.

Телефон / факс +38(048) 723-34-61,

E-mail: semst-journal@onu.edu.ua,

http://semst.onu.edu.ua

Здійснюється анонімне рецензування рукописів статей.

Правила підготовки рукопису:

Рукописи повинні супроводжуватися офіційним листом, підписаним керівником установи, де була виконана робота. Це правило не стосується робіт представлених авторами із закордону чи міжнародними групами авторів.

Авторське право переходить Видавцю.

Титульний аркуш:

1. PACS і Універсальний Десятковий Код Класифікації (УДК) (для авторів із країн СНД) — у верхньому лівому куті. Допускається декілька відділених комами кодів. Якщо ніякі коди класифікації не позначені, код(и) буде(уть) визначено Редакційною Колегією.

2. Назва роботи (по центру, прописними літерами, шрифт 14pt, жирно).

3. Прізвище (-а) автора(-ів) (по центру, шрифт 12pt).

4. Назва установи, повна адреса, телефони і факси, e-mail для кожного автора, нижче, через один інтервал, окремим рядком (по центру, шрифт 12pt).

5. Анотація: до 1000 символів.

6. Ключові слова: їхня кількість не повинна перевищувати восьми слів. В особливих випадках можна використовувати терміни з двома — чи трьома словами. Ці слова повинні бути розміщені під анотацією і написані тією самою мовою.

П.п. 2,3,4,5,6 послідовно викласти українською, англійською і російською мовами.

Для авторів з закордону, які не володіють українською або російською мовами, пп. 2-5 викладаються англійською мовою.

7. До кожного примірника статті додаються реферати українською / російською (в залежності від мови оригіналу статті), та англійською мовами (кожен реферат на окремому аркуші). Особливу увагу слід приділяти написанню резюме статті англійською мовою. Для цього доцільно користуватися послугами кваліфікованих спеціалістів-лінгвістів з подальшим науковим редагуванням тексту автором(-ами). Перед словом «реферат» необхідно написати повну назву статті відповідною мовою, УДК, прізвища та ініціали авторів, назви установ. Реферат обсягом 200-250 слів має бути структурованим: мета (чітко сформульована), методи дослідження, результати дослідження (стисло),

узагальнення або висновки. Після тексту реферату з абзацу розміщуються ключові слова.

8. Текст статті повинен бути надрукований через 1,5 інтервали, на білому папері формату А4. Поля: зліва - 3см, справа - 1,5см, вверху і знизу - 2,5см. Шрифт 12pt. Підзаголовки, якщо вони є, повинні бути надруковані прописними літерами, жирно.

Рівняння повинні бути введені, використовуючи MS Equation Editor або MathType. Роботи з рукописними вставками не приймаються. Таблиці повинні бути представлені на окремих аркушах у форматі відповідних текстових форматів (див. вище), чи у форматі тексту (з колонками, відділеними інтервалами, комами, крапкам з комою, чи знаками табулювання).

9. У кінці тексту статті указати прізвища, імена та по батькові усіх авторів, поштову адресу, телефон, факс, e-mail (для кореспонденції).

10. Список літератури повинен бути надрукований через 1,5 інтервали, з літературою, пронумерованою в порядку її появи в тексті. Бібліографія друкується лише латиницею (кирилиця подається в транслітерації). Порядок оформлення літератури повинен відповідати вимогам ВАК України, наприклад:

[1]. I.M. Cidilkov skii. *Elektrony i dyrki v poluprovodnikah*. Nauka, M. 450 s. (1972).

[2]. J.A. Hall. *Imaging tubes*. Chap. 14 in *The Infrared Handbook*, Eds. W.W. Wolfe, G.J. Zissis, pp. 132-176, ERIM, Ann Arbor, MI (1978).

[3]. N. Blutzer, A.S. Jensen. *Current readout of infrared detectors // Opt. Eng.*, 26(3), pp. 241-248 (1987).

11. Підписи до рисунків і таблиць повинні бути надруковані в рукописі з двома пробілами після списку літератури. Виносок, якщо можливо, бажано уникати.

Приймаються тільки високоякісні рисунки. Написи і символи повинні бути надруковані усередині рисунку. Негативи, слайди, і діапозитиви не приймаються.

Кожен рисунок повинен бути надрукований на окремому аркуші і мати розмір, що не перевищує 160x200 мм. Для тексту на рисунках використовуйте шрифт 10pt. Одиниці виміру повинні бути позначені після коми (не в круглих дужках). Усі рисунки повинні бути пронуме-

ровані в порядку їх появи в тексті, з частинами позначеними як (а), (б), і т.д. Розміщення номерів рисунків і напису усередині малюнків не дозволяються. Зі зворотної сторони, напишіть олівцем назву, прізвище(а) автора(-ів), номер малюнка і позначте верх стрілкою.

Фотографії повинні бути оригінальними. Кольоровий друк можливий, якщо його вартість сплачується авторами чи їх спонсорами.

12. Стаття має бути підписана автором (усіма авторами) з зазначенням дати на останній сторінці.

Автори несуть повну відповідальність за бездоганне мовне оформлення тексту, особливо за правильну наукову термінологію (її слід звіряти за фаховими термінологічними словниками).

13. Датою надходження статті вважається день, коли до редколегії надійшов остаточний варіант статті після рецензування.

Після одержання коректури статті автор повинен виправити лише помилки (чітко, синьою або чорною ручкою неправильно закреслити, а поряд з цим на полі написати правильний варіант) і терміново відіслати статтю на адресу редколегії електронною поштою.

Підпис автора у кінці статті означає, що автор передає права на видання своєї статті редакції. Автор гарантує, що стаття оригінальна; ні стаття, ні рисунки до неї не були опубліковані в інших виданнях.

Відхилені статті не повертаються.

INFORMATION FOR AUTHORS

THE REQUIREMENTS ON PAPERS PREPARATION

Journal «Sensor Electronics and Microsystems Technologies» publishes articles, brief messages, letters to Editors, and comments containing results of fundamental and applied researches, on the following directions:

1. Physical, chemical and other phenomena, as the bases of sensors
2. Sensors design and mathematical modeling
3. Physical sensors
4. Optical, optoelectronic and radiation sensors
5. Acoustoelectronic sensors
6. Chemical sensors
7. Biosensors
8. Nanosensors (physics, materials, technology)
9. Sensor materials
10. Sensors production technologies
11. Sensors and information systems
12. Microsystems and nano-technologies (MST, LIGA-technologies et al.)
13. Sensor's degradation, metrology and certification

The journal publishes the custom-made reviews on actual questions appropriate to the mentioned subjects, current information — chronicle, special papers devoted to known scientists, paid advertising messages, conferences announcements.

The basic article text should meet the SAC Ukraine Presidium Decree requirements from 15.01.2003 № 7-05/1 (SAC Bulletin № 1, 2003) and be structured. The materials sent to Editors, should be written with the maximal text presentation clearness and accuracy. In the submitted manuscript the actuality of problem should be reflected, the purpose of the work should be formulated. It must contain an original part and conclu-

sions providing the received results essence and their novelty understanding. The authors should avoid the new terms and narrowprofile jargon phrase unreasonable introduction.

Journal Edition asks authors at a direction of articles in a print to be guided by the following rules:

1. Manuscripts should be submitted in duplicate in Ukrainian, English, or Russian, a hard copy and supplemented with a text file and figures on a CD. Manuscripts which are offered by authors from Ukraine or CIS countries to the edition in English are necessarily supplemented by Ukrainian or Russian version. An electronic copy may be submitted by e-mail.

2. Acceptable text formats: MS Word (rtf, doc).

3. Acceptable graphic formats for figures: EPS, TIFF, BMP, PCX, CDR, WMF, MS Word and MS Graf, JPEG. Figures created using software for mathematical and statistical calculations should be converted to one of these formats.

4. For articles of authors from Ukraine there should be expert conclusions about an opportunity of an open print.

Manuscripts should be sent to:

Lepikh Yaroslav Illich, The Vice Editor, Odessa National I. I. Mechnikov University, ISEPTC (RL-3), str. Dvoryanskaya, 2, Odessa, 65082, Ukraine.

Phone/fax +38(048) 723-34-61,

E-mail: semst-journal@onu.edu.ua,

http://semst.onu.edu.ua

Manuscripts of articles anonymous reviewing is carried out

The manuscript preparation rules:

The manuscripts should be supplemented with the Official letter signed by a chief manager of the institution where the work was performed. This rule does not apply to papers submitted by authors from abroad or international groups of authors.

Copyright transfer to the Publisher.

Title Page:

1. PACS and Universal Decimal Classification code (for authors from CIS) in the top left corner. Several comma-separated codes are allowed. If no classification codes are indicated, the code(s) will be assigned by the Editorial Board.

2. Title of the paper (central, capital, bold, 14pt).

3. Name (-s) of the author(-s) below, in one space (central, normal face, 12pt).

4. Name of affiliated institution, full address, phone and fax numbers, e-mail addresses (if available) for each author below, in one space (central, normal face, 12pt).

5. Abstract: up to 1000 characters.

6. Keywords: its amount must not exceed eight words. In the specific cases it is acceptable to use two- or three-word terms. These words must be placed under the abstract and written in the same language.

Items 2,3,4,5,6 must be presented in series in Ukrainian, English and Russian languages.

For authors from abroad which do not know Ukrainian or Russian languages, items 2-5 may be presented only in English.

7. To each copy of the article abstracts in Ukrainian / Russian (depending on language of the original all authors of article), and the English language are applied (each abstract on a separate sheet). The special attention should be given to the writing of the article summary in English. For this purpose it is expedient to use the qualified experts - linguists with the further scientific editing the text by the author (-s). Before the word "abstract" it is necessary to write the full article name by the appropriate language, UDC, surnames and the initials of the authors, names of affiliated institutions. The abstract in volume of 200-250 words must be structured: the purpose (precisely formulated),

research methods and results (shortly), generalizations or conclusions. After the text of the abstract from the item key words are placed.

8. Article text should be printed 1,5-spaced on white paper A4 format with a 12pt, margins: left — 3sm, right — 1,5, upper and lower — 2,5sm. Titles of the sections if it is present should be typed bold, capitals.

Equations should be entered using MS Equation Editor or MathType. Papers with handwritten equations are not accepted. Notations should be defined when the first appearing in the text.

Tables should be submitted on separate pages in the format of appropriate text formats (see above), or in the text format (with columns separated by interval, commas, or tabulation characters).

9. At the article text end one must indicate surnames, names and patronymics of all authors, the mail address, the phone, a fax, e-mail (for the correspondence).

10. List of references should be 1,5-spaced, with references numbered in order of their appearance in the text. The bibliography is printed only by the roman type (cyrillics represents in transliteration).

The literature registration order should conform to DAS of Ukraine requirements, for example:

[1]. I.M. Cidilkov skii. *Elektrony i dyrki v poprovdnikah*. Nauka, M. 450 s. (1972).

[2]. J.A. Hall. *Imaging tubes*. Chap. 14 in *The Infrared Handbook*, Eds. W.W. Wolfe, G.J. Zissis, pp. 132-176, ERIM, Ann Arbor, MI (1978).

[3]. N. Blutzer, A.S. Jensen. *Current readout of infrared detectors // Opt. Eng.*, 26(3), pp. 241-248 (1987).

11. Figures and tables captions should be printed in the manuscript double-spaced after the list of references. Footnotes should be avoided if possible.

Only high-quality pictures can be accepted. Inscriptions and symbols should be printed inside picture. Negatives, and slides are not accepted.

Each figure should be printed on a separate page and have a size not exceeding 160x200 mm.

For text inside figures, use 10pt. Measurement units should be indicated after a comma (not in blankets). All figures are to be numbered in order of its appearance in the text, with sections denoted as (a), (b), etc. Placing the figure numbers and captions inside figures is not allowed. On the backside, write with a pencil the paper title, author(s) name(s) and figure number, and mark the topside with an arrow.

Photographs should be submitted as original prints. Color printing is possible if its cost is covered by the authors or their sponsors.

12. The article must be signed by author (all authors) with the date indication on the last page.

Authors bear full responsibility for irreproachable language make out of the text, especially for a correct scientific terminology (it should be verified

under terminological dictionaries of the appropriate speciality).

13. The date of article acceptance is that one when the final variant comes to the publisher after a prepublication review.

After obtaining the proof sheet the author should correct mistakes (clearly cancel incorrect variant with blue or black ink and put the correct variant on border) and send urgently the revised variant to the editor by e-mail.

Author's signature at the article end vouches that author grants a copyright to the publisher. Author vouches that the work has not been published elsewhere, either completely, or in part and has not been submitted to another journal.

Not accepted manuscripts will not be returned.

Комп'ютерне верстання – О. І. Карлічук

Підп. до друку 21.09.2017. Формат 60×84/8.
Ум.-друк. арк. 11,63. Тираж 300 пр. Зам. № 1656.

Видавець і виготовлювач
Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4215 від 22.11.2011 р.

Україна, 65082, м. Одеса, вул. Єлісаветинська, 12
Тел.: (048) 723 28 39