

**Б.К.Остафійчук, В.Д.Федорів, В.О.Коцюбинський,  
В.В.Мокляк, І.П.Яремій**

## **МЕССБАУЕРІВСЬКІ ДОСЛІДЖЕННЯ МАГНІТНОЇ МІКРОСТРУКТУРИ $\text{CaGe}$ -ЗАМІЩЕНИХ МОНОКРИСТАЛІЧНИХ ФЕРИТ-ГРАНАТОВИХ ПЛІВОК В ЗОВНІШНЬОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ.**

*В роботі наведено результати мессбауерівських досліджень  $\text{CaGe}$ -заміщених монокристалічних ферит-гранатових плівок (ФГП) у зовнішньому магнітному полі. Експериментально встановлено наявність у а-позиції гранатової структури іонів цинку у парамагнітному стані. Визначено критичний об'єм дрібнодисперсних областей, які перебувають у стані суперпарамагнетизму в імплантованому іонами  $V$  ( $E$  80 кеВ,  $D$   $6 \cdot 10^{15}$  см<sup>2</sup>) шарі ФГП та продемонстровано ефективність використаного методу дослідження для оцінки їх вкладу у парамагнітну складову КЕМ спектру.*

### **Вступ.**

Метод конверсійної електронної мессбауерівської спектроскопії (КЕМС) є неруйнівним та інформативним методом дослідження приповерхневих шарів епітаксійних ФГП. Висока роздільна здатність ( $10^{-10}$  еВ [1]) дозволяє отримати інформацію про локальне оточення атомів заліза, яке визначає розподіл електронної густини  $s$ -електронів на резонансному ядрі  $Fe^{2+}$ . Оскільки близько 80% конверсійних електронів виходить з глибини до 1000Å, то КЕМ спектр містить інформацію про магнітну та кристалічну мікроструктури в приповерхневих шарах ФГП. Дослідження ФГП в зовнішньому постійному магнітному полі (МП) розширює можливості методу мессбауерівської спектроскопії, дозволяючи дослідити поведінку анізотропної частини надтонкого магнітного поля на ядрі в умовах зміни орієнтації вектора намагніченості відносно осей кристалічних симетрій[2].

### **Особливості кристалічної та магнітної мікроструктури ФГП.**

Іони заліза у структурі гранату знаходяться в двох кристалічно-нееквівалентних окта- та тетрапорожнинах (а- та d-позиції). Залежність квадрупольного розщеплення від величини кута  $\theta$  між напрямом ефективного магнітного поля  $H$  та віссю симетрії градієнта електричного поля (ГЕП) зумовлює появу трьох нееквівалентних тетраедричних позицій заліза, які визначаються напрямком осей симетрії [100], [010] і [001]; та чотирьох октаедричних позицій, що відповідають напрямкам ГЕП [111], [111], [111] та [111]. Таким чином мессбауерівський спектр залізо-ітрієвого гранату (ЗІГ)  $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$  представляє собою суперпозицію семи парціальних секстетів. Для монокристалічних плівок  $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ , вирощених на гадоліній-галієвих підкладках з площиною зрізу (111), набір кутів скорочується до трьох

$\theta_s = 0$ ,  $\theta_{a_+} = 70^{\circ}52'$ ,  $\theta_d = 54^{\circ}44'$  і мессбауерівський спектр можна апроксимувати трьома компонентами зі співвідношенням площ  $S_d : S_{a_+} : S_{a_-} = 6 : 3 : 1$  [3].

Порушення непрямої обмінної взаємодії при заміщенні заліза в тетра- та октапозиціях на немагнітні іони [4] (у нашому випадку  $Ge^{4+}$ ) чи руйнуванні кристалічної структури при іонній імплантації [5] приводить до появи магнітонееквівалентних позицій заліза з меншими ефективними полями на ядрах, аж до появи парамагнітного стану іонів  $Fe^{2+}$ .

Для імплантованих ФГП, як показано в [6], частину плівки з порушеними імплантацією кристалічними зв'язками можна модельно представити як систему, що складається з аморфної області та дефектної кристалічної зони, яка оточує її. При збільшенні дози опромінення відбувається перекриття окремих дефектних областей що приводить до утворення ультрамалих порушених кристалічних зон, оточених аморфною парамагнітною структурою. Існування кристалітів малих розмірів доведено експериментально [7,8] і добре узгоджується з пропонуваними механізмами аморфізації порушеного шару за рахунок об'єднання окремих кластерів радіаційних дефектів [9,10]. Відомо [11], що наночастинки магнетиків, розмірами  $\sim 10^2 \text{ \AA}$ , володіють монодоменною магнітною структурою. Вектор магнітного моменту частинки під дією теплових флуктуацій змінює просторову орієнтацію за час  $\sim 10^{-11} \text{ с}$  і вона перебуває в стані суперпарамагнетизму. Можна очікувати, що прикладання зовнішнього магнітного поля буде "заморожувати" осциляції магнітних моментів нанообластей, що приведе до зменшення парамагнітної складової в мессбауерівському спектра і дасть можливість провести оцінку розмірів суперпарамагнітних частинок.

### Експеримент.

Конверсійні електронні мессбауерівські спектри отримувалися від  $CaGe$ -заміщених ФГ плівок складу  $Y_{1,0}Lu_{0,63}Sm_{0,55}Ca_{0,8}Pb_{0,02}Fe_{4,1}Ge_{0,9}O_{12}$  товщиною 3,5 мкм вирощених методом рідкофазної епітаксії на підкладці монокристалу гадоліній-галієвого гранату ( $Gd_3Ga_5O_{12}$ ) з площиною зрізу (111). Кристалографічна розорієнтація зразків не перевищувала  $7^{\circ}$ . Для поліпшення якості КЕМ спектрів заліза у вихідній шихті використовувався оксид  $Fe_2O_3$ , збагачений до 8% ізотопом  $Fe^{57}$ . КЕМ спектри  $Fe^{57}$  отримувалися при кімнатній температурі з використанням джерела гамма-квантів  $Co^{57}$  в хромовій матриці з активністю  $\sim 35 \text{ мКи}$  в режимі постійних прискорень. Для реєстрації конверсійних електронів використовувався пропорційний газопроточний лічильник, що працював на суміші 96%He+4%CH<sub>4</sub>.

Калібрування КЕМ спектрів заліза проводилось відносно металічного  $Fe$ .

Для зразка №1 досліджувався вплив зовнішнього МП на магнітні моменти мессбауерівських ядер з порушеними обмінними зв'язками. Зразок №2 опромінювався іонами В з енергією 80 кеВ та дозою  $6 \cdot 10^{10}$  іон/см<sup>2</sup>. Імплантація проводилась при кімнатній температурі на установці типу "Везувій" в режимі, що виключав каналювання. Для запобігання ефекту самовідпаду густина струму імплантації не перевищувала 2мкА/см. Зовнішнє магнітне поле величиною 2,9 кЕ створювалося системою постійних магнітів, і орієнтувалося перпендикулярно до площини півки. Орієнтація вектора магнітного моменту  $Fe$  відносно напрямку  $\langle 111 \rangle$  визначалася виходячи з співвідношення між інтенсивністю ліній в секстетах та кутом  $\alpha$  між напрямком вектора намагніченості та напрямком поширення гамма-квантів 3:х:1:х:3, де х- відносна інтенсивність 2 та 5 компонент сектетів ( $\alpha = \arctan \frac{x}{1 + 2\text{ctg}^2 \alpha}$ ,  $\alpha$  – кут між напрямком поширення  $\gamma$ -квантів, що співпадає з нормаллю до поверхні півки та напрямом магнітного моменту ФГП).

Для коректного аналізу експериментальних КЕМ спектрів розраховано значення величин ймовірностей утворення кожного з нееквівалентних положень мессбауерівських атомів  $Fe$  як в d- так і в а-позиції (табл. 1,2.) за формулою [3]:

$$P^{(n)} = \frac{z!}{n!(z-n)!} k^{(z-n)} (1-k)^n,$$

де  $z$  – координаційне число ( $z = 4; 6$ ),  $n$  – число магнітних сусідів  $Fe$  ( $0 \leq n \leq z$ ),  $k$  – відносна кількість  $Fe$  у сусідніх підгратках. Виходячи з отриманих даних експериментальний КЕМ спектр заліза від неімплантованої ФГП апроксимувався трьома парціальними секстетами (табл. 1,2) – один відповідає тетракоординації заліза з трьома та двома магнітними сусідами і два – октакоординації відповідно з 3 і 4 та 5 і 6 магнітними сусідами та дублетом. Виходячи з моделі Джілео [12], згідно якої при числі магнітних сусідів  $= 2$  мессбауерівський атом знаходиться в парамагнітному стані та розрахованих ймовірностей оточення можна припустити, що парамагнітна складова зумовлена іонами  $Fe$ , які знаходяться в октапозиціях. КЕМ спектр заліза, отриманий від іонно-імплантованого зразка апроксимувався двома секстетами, що відповідають а- та d-позиціям заліза та дублетом.

Ці модельні уявлення було взято за стартове наближення при математичній обробці мессбауерівських спектрів за допомогою програми UNIVEM 3.0.

Результати експерименту та їх обговорення.

Аналіз отриманих результатів (таб.1 та рис.1) показав що, в зовнішньому МП відбувається зменшення відносного вмісту парамагнітної складової КЕМ спектру заліза з ~7% до ~3%. Це зумовлюється переходом частини іонів Fe<sup>3+</sup> з числом магнітних сусідів ≤ 2 у магнітовпорядкований стан. Розраховані відношення інтегральних інтенсивностей компонент КЕМ спектрів Fe<sup>57</sup> отриманих в магнітному полі та ріст відносної кількості іонів Fe α-позиції, які перебувають в магнітовпорядкованому стані підтверджують припущення про належність парамагнітних іонів Fe до α-позиції.

Табл.1. Розрахункові параметри парціальних мессбауерівських спектрів заліза ФГП складу  $Y_1Li_{0,63}Sm_{0,55}Ca_{0,8}Pb_{0,02}Fe_{4,1}Ge_0O_{12}$ .

	Корр. число	Число магн. сусідів	Імовірна частка %	% Fe з відн. магн. оточ.	a, мм/с	L, мм/с	Q <sub>v</sub> , мм/с	H, KE	S %	S <sub>0</sub> /S <sub>∞</sub>	n <sub>0</sub> /n <sub>∞</sub>	I <sub>0</sub> /I <sub>∞</sub>	α'
Магнітний	β (тетра-поз.)	0	0	0.0	0,65	0,08	0,005	376	54	1,19	1,13	3:0,261	20
		1	0	0.0									
		2	0,3	0.2									
		3	8,5	4.4									
		4	91,3	47.8									
		6 (окта-поз.)	0	0,1									
	1	0,8	0.4										
	2	5,1	2.4										
	3	16,9	8.0										
	4	31,8	15.1										
	5	31,9	15.3										
	6	13,4	6.5										
Належне поле	β (окта-поз.)	0	0	0.0	0,58	0,12	-0,09	373	54	1,19	1,13	3:0,081	10
		1	0	0.0									
		2	0,29	0.2									
		3	8,46	4.4									
		4	91,3	47.8									
		α (окта-поз.)	0	0,1									
	1	0,8	0.4										
	2	5,1	2.4										
	3	16,9	8.0										
	4	31,8	15.										
	5	31,9	15.3										
	6	13,4	6.5										
0	0	0.0	0,18	0,06	1,97	3							
1	0,8	0.4											
2	5,1	2.4											
3	16,9	8.0											
4	31,8	15.											
5	31,9	15.3											
6	13,4	6.5											
0	0	0.0	0,81	0,29	0,25	383	18						
1	0,8	0.4											
2	5,1	2.4											
3	16,9	8.0											
4	31,8	15.											
5	31,9	15.3											
6	13,4	6.5											
0	0	0.0	0,47	0,31	0,06	440	25						
1	0,8	0.4											
2	5,1	2.4											
3	16,9	8.0											
4	31,8	15.											
5	31,9	15.3											
6	13,4	6.5											

Аналіз експериментальних спектрів показав, що лінії секстиплетів, які відповідають октапозиціям, уширені, що свідчить про неперервний розподіл ефективних магнітних полів на ядрах заліза за рахунок неоднорідності оточення. В магнітному полі спостерігається тенденція до зменшення ширини ліній парціальних підспектрів, яку можна пояснити зменшенням ефективної товщини зразка за рахунок спіралеподібного руху конверсійних електронів в магнітному полі та зростанням часу релаксації спіну  $s$ -електрона в порівнянні з часом ларморівської прецесії спіну ядра [13].

В роботі [2] показано, що накладання зовнішнього магнітного поля приводить до росту величини магнітного поля на ядрі в  $a$ -позиції ЗІГ на 10 кЕ, що обумовлюється зміною орієнтації вектора намагніченості відносно кристалографічної осі  $\langle 111 \rangle$ . В нашому випадку зміни ефективних магнітних полів на ядрах не спостерігається. Це можна пояснити виходячи з наступних міркувань. З симетрією локального оточення мессбауерівського атома заліза та просторовою орієнтацією магнітного моменту ядра відносно неї пов'язана величина ефективного магнітного поля на ядрі, анізотропна поведінка якого визначається біполярним вкладом, який для  $a$ -положення задається співвідношенням:

$$V^{SD}(\beta) = V_A (3 \cos^2 \beta_0 - 1),$$

де  $V^{SD}(\beta)$  – анізотропна частина магнітного поля на ядрі,  $\beta$  – кут між головною компонентою  $V_{zz}$  тензора ГЕП та вектором  $V$  внутрішнього поля на ядрі,  $V$  лежить в межах  $-2,4^+ - 3,4$  кЕ. Спостережувана зміна кута орієнтації вектора намагніченості ФГП відносно нормалі до півки під впливом зовнішнього постійного магнітного поля з  $\sim 20$  до  $\sim 10$  відно з розрахунками повинна привести до зменшення  $V^{SD}(\beta)$  на  $\sim 1$  кЕ, що знаходиться в межах похибки методу.

Результати аналізу мессбауерівських спектрів заліза, отриманих від іонно-імплантованих ФГП (таб.2 та рис.2) вказує на наявність парамагнітної фази в імплантованому зразку, яка обумовлена іонноаморфізованим шаром та дрібнодисперсними областями.

Для ФГП після імплантації спостерігається значне уширення ліній, які відповідають магнітовпорядкованому стану  $Fe^{2+}$  як в  $a$  – так і  $d$ -підгратках, що пояснюється спотвореннями кристалічної ґратки радіаційними дефектами в перехідній області імплантована зона – монокрystalічна плівка де резонансні ядра  $Fe^{2+}$  характеризуються неперервним розподілом ефективних магнітних полів. Зменшення відносної площі парамагнітного дублету на  $\sim 7\%$ , по всій ймовірності, очевидно зумовлене “замороженням” орієнтації магнітних моментів атомів заліза в ультрамалих кристалах зовнішнім магнітним полем.

Отримані результати можна пояснити, використовуючи модель теплових коливань магнітного моменту монодоменної частинки розроблену Неелем [11,13], відповідно до якої в нанообластях магнетиків проявляється явище суперпарамагнетизму. При розмірах монокристалічних магнітних областей порядку  $\sim 10^2 \text{ \AA}$  в результаті теплових флуктуацій спостерігаються осциляції магнітного моменту по відношенню до напрямків осей легкого намагнічення, що приводить до нульової величини середнього значення ефективного поля на ядрі  $Fe^{57}$  [13].

Монодоменна частинка буде фіксуватися методом мессбауерівської спектроскопії як парамагнітна, якщо період осциляцій магнітного моменту  $\tau_r$  буде меншим за час життя збудженого стану мессбауерівського ядра  $Fe^{57}$  ( $\tau_0 = 1,4 \cdot 10^{-7} \text{ c}$ ). Максимальний об'єм частинки магнетика, в якій вимірювальним полем частотою  $2\pi/\tau_0$  можна зафіксувати суперпарамагнітний стан визначається співвідношенням [11]:

$$V_{кр} = \frac{2kT \ln(2\tau_0 f_0)}{M H_{кр}}$$

Табл.2.

Розрахункові параметри парціальних мессбауерівських спектрів заліза ФГП складу  $Y_{1,0}Li_{0,63}Sm_{0,55}Ca_{0,8}Pb_{0,02}Fe_{4,1}Ge_{0,9}O_{12}$ , імплантованих іонами  $B^+$  ( $E=80 \text{ кеВ}$ ,  $D=6 \cdot 10^{15} \text{ см}^2$ ).

	Корд. число	$a, \text{ мм/с}$	$I_s, \text{ мм/с}$	$Q_s, \text{ мм/с}$	$H, \text{ кЕ}$	$S, \%$
Імплантований	4 (тетра-позиції)	0,65	0,02	0,10	373	7
	6 (окта-позиції)	1,24	0,12	0,08	450	6
	парамагн. Фаза	0,67	0,23	1,28		87
Імплантований. зіомка в магнітн. полі	4 (тетра-позиції)	0,99	0,03	0,25	370	10
	6 (окта-позиції)	1,09	0,25	0,06	437	10
	парамагн. фаза	0,65	0,24	1,30		80

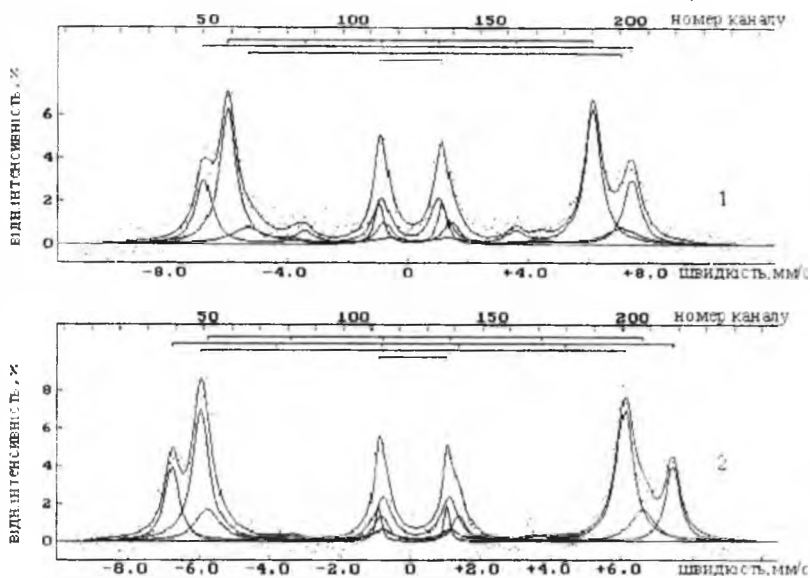


Рис. 1. КЕМ спектри заліза ФГП складу  $Y_{1,0}Li_{10}Sm_{0,63}Sr_{0,55}Ca_{10}Rb_{0,12}Fe_{11}(Ge_{10}O_{12})_2$ : 1-вихідний, 2- в зовнішньому магнітному полі 2,9 кЕ

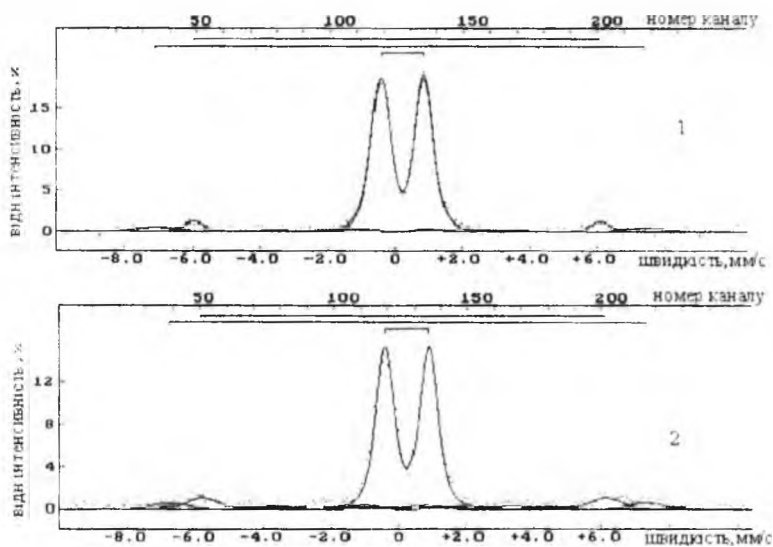


Рис. 2. КЕМ спектри заліза ФГП складу  $Y_{1,0}Li_{10}Sm_{0,63}Sr_{0,55}Ca_{10}Rb_{0,12}Fe_{11}(Ge_{10}O_{12})_2$ : 1- імплантований іонами В з енергією 80 кЕВ та дозою  $6 \cdot 10^{15}$  іон. см $^{-2}$ ; 2- імплантований, зйомка в в зовнішньому магнітному полі 2,9 кЕ

де  $f_0$  – частотний фактор, мало залежний від температури, і в першому наближенні рівний частоті прецесії магнітного моменту частинки в ефективному зовнішньому магнітному полі  $H_{\text{eff}}$ :

$$f_0 = \frac{\gamma}{2\pi} H_{\text{eff}}$$

$H_{\text{eff}}$  – поле, що характеризує магнітну взаємодію між іонами  $\text{Fe}^{17+}$ :

$$H_{\text{eff}} = \frac{kT_N}{\mu_B}$$

де  $T_N$  – температура Нееля, при якій зникає феримагнітний стан речовини. Зовнішнє магнітне поле обумовлює зростання величини ймовірності орієнтації вектора  $M$  за напрямком  $H$  і, як результат, до збільшення часу релаксації  $\tau_r$  магнітного моменту частинки об'ємом  $V < V_{\text{кр}}$ . Залежність  $\tau_r(H, V)$  при сталій температурі описується виразом:

$$\tau_r = \frac{2}{f} \frac{\exp\left(\frac{VK + V(MH)^2}{4kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{-VMH}{kT}\right)}$$

При значенні величини напруженості магнітного поля  $H_{\text{кр}} = \frac{2K_u}{M}$  ймовірність орієнтації вектора  $M$  за полем стає максимальною і подальше збільшення величини  $H$  зовнішнього магнітного для незмінного часу спостереження ( $\tau_0 = 1,4 \cdot 10^{-7}$  с) вже не буде “заморожувати” магнітні моменти частинок, меншими за деякий мінімальний об'єм  $V_{\text{мін}}$ . Константа магнітної одновісної анізотропії плівки  $K_u$  та магнітний момент одиниці об'єму визначено магнітооптичним методом і для даних плівок складають відповідно  $4600 \text{ Дж/м}^3$  та  $0,02 \text{ А/м}$ .

Вищенаведені співвідношення були використані для оцінки розмірів монокристалічних областей (згідно моделі сферичних частинок), які під впливом зовнішнього магнітного поля перейшли із стану суперпарамагнетизму у магнітовпорядкований (рис.3). Накладання зовнішнього поля  $2,9 \text{ кЕ}$  “переводить” в магнітовпорядкований стан частинки з радіусами  $\sim 120\text{-}130 \text{ \AA}$ .



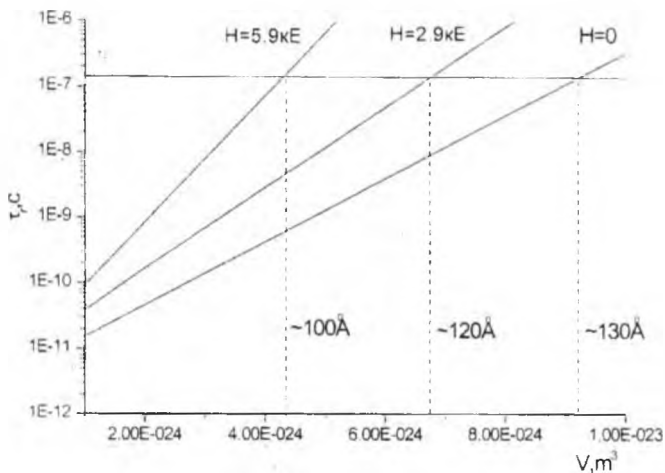


Рис.3. Розрахункові залежності часу релаксації магнітного моменту  $M$  дрібнодисперсної області в залежності від її об'єму в зовнішньому магнітному полі різної

### Висновки.

Таким чином мессбауерівська спектроскопія ферит-гранатових плівок в зовнішньому постійному магнітному полі доводить існування парамагнітних іонів  $Fe^{2+}$  в октапозиції для заміщених ФГП. При дослідженні іонно-імплантованих ФГП, зовнішнє магнітне поле приводить до “замороження” магнітних моментів в нанокристалічних областях, які знаходилися в стані суперпарамагнетизму.

*Conversion Mossbauer spectroscopy is applied to the study Ca-Ge-substituted monocristall. ferrit-garnet epitaxial films in the external magnetic field. The presence of iron ions in the paramagnetic state in the a-position of garnet structure was experimental established. The critical volume of the superparamagnetic ultrafine particles in the ion-irradiated ( $B^+$ ,  $E=80 \text{ keV}$ ,  $D=6 \cdot 10^{15} \text{ sm}^{-2}$ ) region ferrite-garnet film and their contribution in the paramagnetic component of CEM spectrums was obtained.*

1. Блозерский Г.Н. Мессбауеровская спектроскопия как метод исследования поверхности. – М. Энергоиздат, 1990. – 352 с.
2. Б.К.Остафійчук, В.М.Ткачук, О.М.Ткачук, В.Д.Федорів Мессбауерівські дослідження монокристалічних плівок залізо-ітрієвого гранату у зовнішньому магнітному полі // Металлофізика и новейшие технологии –2000. – Т.22. – №11 – С.11–16.
3. Башикиров Ш.Ш., Ивойлов Н.Г., Романов Е.С., Кирменский А.П. Конверсионные мессбауеровские исследования эпитаксиальных пленок смешанных ферритов-гранатов // ФГТ – 1982. – Т.24. – В.9. – С.2641–2647.

4. Любутин И.С. Изучение магнитных свойств и кристаллохимии ферритов-гранатов с помощью мессбауеровской спектроскопии. – В кн.: Физика и химия ферритов. М.: изд.МГУ, 1973. – С.69–98.
5. Немошкаленко В.В., Остафійчук Б.К., Олейник В.А., Федорив В.Д., Гринченко А.Ю., Скакун Н.А. Магнитное и структурное разупорядочение феррит-гранатовых пленок, имплантированных ионами бора // ФТТ. – 1990. – Т.32. – №3. – С.707–713.
6. Ю.Г.Чукалкин, В.Р.Штирц Эффекты ковалентности в дефектном  $Y_3Fe_5O_{12}$  // ФТТ. – 1990. – Т.32. – №11. – С.3306–3313.
7. Yoshiie T., Bauer C.L., Kryder M.H. Characterization of microstructure in ion-implanted garnet by transmission electron microscopy // IEEE Transactions on Magnetics. – Mag.19. – №5. – P.1823–1825.
8. Линкова Д.Е., Осуховский В.Е., Рудик Е.И. и др. Дефекты ионно-имплантированного слоя феррит-гранатовых пленок // ФТТ. – 1982. – Т.24. – №5. – С.1308–1312.
9. A.M.Gusman, T.Yoshiie, C.L.Bauer, M.H.Kryder Amorphisation of garnet by ion implantation // Mat.Res.Symp.Proc. – Vol.27. – 1984 – P.139–144.
10. Остафійчук Б.К., Ткачук В.М., Ворончак О.Н., Яворский Б.И. О возможном механизме аморфизации поверхности феррит-гранатовых пленок вследствие ионной имплантации // Металлофизика и новейшие технологии. – 1994. – Т.16. – №8. – С.51–54.
11. Вонсовский С.В. Магнетизм. – М.: Наука, 1971. – 1031с.
12. Gilleo V.A. Ferromagnetic insulators: garnets-ferromagnetic materials, v.2. Ed. by Wohlfarth, North-Holland Publishing Company. – 1980. – P.1–53.
13. Суздаев И.П. Динамические эффекты в гамма-резонансной спектроскопии. – М.: Атомиздат, 1979. – 192 с.

**І.Ф.Миронюк, В.В.Лобанов, Б.К.Остафійчук,  
І.І.Григорчак, Р.В.Ільницький, Р.П.Лісовський**

## **ІНТЕРКАЛЯЦІЯ ЛІТІЮ В $TiO_2$ : ЕНЕРГЕТИЧНИЙ РЕЛЬЄФ, ВПЛИВ НА ЕЛЕКТРОННУ СТРУКТУРУ ТА ОСОБЛИВОСТІ ТЕРМОДИНАМІКИ ПРОЦЕСУ**

*Квантово хімічним методом у валентному наближенні розглянута електронна будова кластерів, які моделюють інтеркальований літійом стан рутилу й анатазу. На підставі розгляду локальних густин станів зроблено висновок про незмінність структури енергетичних зон рутилу й анатазу при проникненні в них невеликих кількостей атомів літію. Методом ЕРС з використанням формалізму спектроскопії хімічного потенціалу досліджено поведінку термодинамічних параметрів процесу інтеркалювання анатазу*

Прагнення до удосконалення джерел живлення з інтеркаляційним механізмом струмоутворюючих реакцій актуалізувало дослідження, спрямовані на отримання нових речовин, здатних оборотно поглинати й