

## **Авторска справка за научните приноси в трудовете на д-р Любомир Николов Николов**

Основните приноси в представените научни публикации се отнасят до експериментални и теоретични изследвания в областта на нови твърдотелни материали и комплексни течни системи.

### **I. Нови твърдотелни материали**

#### **I.1. Изследване на дефекти в обемната структура на полупроводникови материали, причиняващи дълбоки нива в забранената зона [20, 27, 29].**

За първи път са измерени спектри на фотопроводимост на полуизолиращ GaAs, обемно легиран с Cr (SI GaAs:Cr) при стайна (293K) и ниска (77K) температури. В ниско- и високоенергетичната области на спектрите са открити за първи път две характерни структури, които са интерпретирани съответно като дълбокото (в забранената зона на полупроводника) акцепторно ниво, свързано с  $\text{Cr}^{2+}$  и дълбокото донорно ниво, означавано в литературата като EL2. Определени са оптичните енергии на йонизация (спрямо зоната на проводимост) на двете дълбоки нива и параметъра на Франк-Кондън за  $\text{Cr}^{2+}$  нивото [20,29]. Измерени са фотолуминисцентни спектри на образци от обемен GaAs:Sn. От данните за насищането на дълбокото ниво PL като функция на интензитета на лазерната светлина е направен извод за концентрацията на дълбокото ниво PL в различни образци [27].

#### **I.2. Модифициран метод за измерване на повърхностно фотоелектродвижещо напрежение в полупроводникови структури [13,19].**

Класическият метод на Келвин за измерване на контактна потенциална разлика е усъвършенстван в следните две направления. Като вибриращ електрод е използвана биморфна пиезоелектрична пластина със закрепен на единия ѝ край платинен електрод във формата на сфера с размер около 0.5 mm. На електрода се подава автоматизирано плавно стъпаловидно напрежение с минимална стъпка до 0.001mV. Осъществено е автоматизирано събиране на данните (data acquisition), което дава възможност за статистически анализ в реално време. По този начин точността на метода е повишена с около порядък.

Получените по т.1.1 и т.1.2 експериментални резултати са от важно значение и биха могли да намерят приложения за производството на слънчеви батерии, фотодетектори, качествяване на материали за микроелектрониката.

#### **I.3. Автоматизация на експеримента [13, 18, 19]**

Охарактеризирани са полупроводникови материали и структури от Si и GaAs чрез електрични и фотоелектрични методи. Разработена е оригинална установка за автоматизирано управление на физическия експеримент и автоматично натрупване и/или статистическа обработка на данните. Оригинално хардуерно и софтуерно осигуряване са разработени на основата на международния протокол IEEE-488. Установката включва комерсиално закупени прибори HP 4140B pA meter/DC voltage source, lock-in amplifier EG&G Brookdeal PARC 5206, мултиметър, както и блокове за управление на стъпков двигател за автоматична промяна на дължината на вълната на монохроматор SPEX, цифрово-аналогови и аналогово-цифрови преобразуватели и др. Установката допуска управление до 32 отделни прибора. С нейна помощ са измерени с висока точност и надеждност спектри на повърхностно фотоелектродвижещо напрежение в GaAs, както и дифузионните дължини на неосновните носители на заряд в p-GaAs, p-Si/SiO<sub>2</sub> структури, аморфен силиций.

#### **I.4. Теоретично моделиране на дефекти в обема на полупроводникови материали, причиняващи дълбоки нива в забранената зона [22]**

Разработена е програма за числено пресмятане на заряда върху повърхността на кристални полупроводникови материали. Програмата е приложена за определяне на повърхностната проводимост в полуизолиращ GaAs легиран с Cr в присъствие в обема на дълбокото акцепторно  $\text{Cr}^{2+}$  и донорно ниво EL2. Изследвани са случаите на присъствието на тези нива поотделно и заедно в обема на образеца. Показано е, че за формирането на повърхностния заряд на полупроводника основно влияние играе съотношението на концентрациите на нивата.

## **II. Теоретично и числено моделиране на комплексни течни системи**

### **II.1. Хидродинамични взаимодействия в емулсионни системи [2, 17, 26]**

Предложена е универсална процедура за теоретично моделиране на съвместното действие на масопеноса и осиметрични флуидни течения в емулсионни системи в присъствие на разтворим сърфактант. Изведени са аналитични изрази за локалните (полета на скорости и налягане) и интегралните (съпротивителна сила) характеристики на взаимодействията при ниски и високи вискозитети на средата. Установено е, че тангенциалната подвижност на междуфазовата граница играе основна роля за свойствата на емулсионните системи в случая на разтворим сърфактант. Изчислена е скоростта на коалесценция в подобни системи [17,26].

Моделирано е течението между две капки в течна среда в случая на малък вискозитет на течността в капките. Проведен е скейлинг анализ на стационарните уравнения Навие-Стокс, за случая когато разстоянието между капките е малко в сравнение с размера им и между тях се образува тънък течен филм. Предложен е работещ модел, който отчита тангенциалната подвижност на границите, анизодиаметрията на задачата и взаимното влияние на теченията в съседните фази. Получени са асимптотични уравнения за течението на тънкия филм между капките, които са подходящи при висока тангенциална подвижност. Анализът на скоростта при малки вискозитети е проведен за две еднакви мехурчета и капчици при такива разстояния между тях, че деформацията на междуфазовите граници е пренебрегната. Пресметнати са силата на съпротивление и скоростта на коалесценция в емулсионни системи, в отсъствие на ПАВ. [2]

### **II.2. Повърхностна дифузия на границата разтвор/въздух [14, 16]**

Доразвита е теорията на Brenner и Leal за коефициента на повърхностна дифузия ( $D_S$ ) на браунова частица в случая на наличие на разтворим сърфактант в системата. С помощта на метода на хидродинамичните потенциали е изведена нова формула за  $D_S$ . Полученият израз е много удобен за експериментална проверка и показва, че намаляването на подвижността на частицата води до намаляване на  $D_S$ .

### **II.3. Динамични взаимодействия на микрочастици във външни течения край междуфазови граници [1, 5-12, 15, 24, 31]**

За първи път е моделирано динамичното взаимодействие на фини частици с течение на граничен слой около напълно спряна (пластина) и напълно свободна (изплуващо в течност мехурче) фазови граници.

Предложена е последователна процедура за анализ на полето на смущение, което една твърда сфера внася във външното течение на граничния слой. По отношение типа на пертурбационното поле частиците е установено, че те се разделят на три групи: малки; средноголеми и големи. Малките създават чисто вискозно поле, средноголемите – инерчно-вискозно, а най-големите - изцяло инерчно. Класификацията на частиците по размер е представена чрез критерий, който съдържа параметри само на граничния слой ( $L$  и  $Re_L$  -

дължината на пластината и числото на Рейнолдс за граничен слой край пластина; а  $R_B$  и  $Re_B$  - радиуса и числото на Рейнолдс за граничен слой около изплуващ мехур). За малките и средноголемите частици са получени аналитични изрази за компонентите на скоростите и налягането в пертурбираната система. Основният получен резултат е, че малките и средноголемите обекти се задържат в граничнослойната област. Малките частици се задържат по-ефективно от граничния слой край мехур, докато средноголемите - от граничния слой край пластина. Най-големите частици се изхвърлят навън от граничния слой [5-12,15].

За първи път са получени теоретично траекториите на фини хидрофилни частици с микронови размери в граничен слой край изплуващи мехурчета. С помощта на числени експерименти е показано, че граничният слой край по-големите мехури спомага за изхвърлянето на частиците вън от слоя. При по-малките мехурчета обаче, се създават условия в граничния слой, които способстват залавянето на частиците [5,6].

Установено е, че присъствието на една частица в граничния слой води намаляване на интензитета на външното поле. Ако втора частица попадне във вече смутеното от първата частица поле, тя допълнително се забавя. Тенденцията за нейното задържане в граничния слой е още по-голяма. За всяка следваща частица ефектът на задържане е все по-силен. По този начин индивидуалното взаимодействие на отделните частици с външното течение води до възникване на съществен колективен ефект. Установено е, че колективният ефект е по-силно изразен при граничен слой край мехур, отколкото край пластина. Тази теоретична схема позволява да се предвиди, че полидисперсна суспензия се разслоява в граничен слой край пластина: най-фините частици се разполагат най-близо до стената, а по-големите - по-далеч от нея. В случая на фини частици и полидисперсни мехурчета се захващат преимуществено най-малките фракции. Тези теоретични предвиждания са в много добро съгласие с наличните експериментални резултати [6].

Пресметнато е времето за престой на фини хидрофилни частици в околност на изплуващи мехурчета. Установени са области от размери на частиците и мехурчетата, за които задържането на частиците в близост до мехурчетата е оптимално. Дефинирани са понятията: (i) ефективност на захващане на частица с определен размер от различни по големина мехури; (ii) ефективност на захващане на частици с различен размер от мехур с фиксиран радиус. Пресметнатите теоретични зависимости описват много добре необичайните данни от флотационни и сепарационни експерименти. По този начин опитните резултати от разпенване на суспензии за първи път намират своето теоретично обяснение [1,5,24,31].

Предложената теоретична схема е развита с отчитане на теглото на частиците. Установено е, че за микронови и суб-микронови частици има оптимален интервал от плътности, в който едновременното действие на хидродинамичните взаимодействия и гравитационните ефекти води до повишаване ефективността на захващане на частиците от изплуващи мехури [1,31].

Получените резултати са от много важно значение за изясняване механизма на елементарния акт при флоатционните и сепарационни процеси. Друга потенциална област на приложение те биха намерили и в индустрията, при извличане на фини фракции от природни суровини, при пречистването на природни и отпадни води от фини примеси, които трудно се премахват чрез други методи.

#### **II.4. Междумолекулни взаимодействия в амфифилни структури [4,25]**

Изследвани са бислоини липидни мембрани (БЛМ) от основния фосфолипиден компонент на биологичните мембрани DPPC по porous plate метода. От експеримента са получени зависимостите за вероятност за образуване и време на живот на БЛМ от фосфолипидната концентрация. Определена е критичната концентрация ( $C_c$ ) на образуване на бислоя. Установен е по-широк концентрационен интервал, в който се получените бислоеве са метастабилни, за разлика от черните пенни филми от DPPC. Експериментално определените времена на живот на БЛМ в концентрационния интервал позволяват фитване с теорията на Ексерова и Кашчиев за стабилността и пропускливостта на амфифилни бислоеве. На базата на

фитовете е направена оценка на физичните константи: енергия на свързване, линейна енергия на дупка, характеризиращи близкодействащите междумолекулни взаимодействия в бислоя. Сравнени са параметрите от теорията, получени за БЛМ с тези за черните пенни филми от DPPC и е показано, че стойностите са по-ниски, което определя съществуването на метастабилни БЛМ от DPPC.

### **II.5. Теоретично моделиране на синерезис на пени [3,30]**

Направен е теоретичен анализ на експериментално наблюдаваното влияние на типа на тънкия течен филм (обикновен, обикновен черен и нютонов черен) върху скоростта на изтичане на пенни системи, съставени от тези филми. Предложен е теоретичен модел, който за пръв път отчита влиянието на преходна зона между филмите и каналите на Плато. Анализирани са ролята на тази зона върху процесите на изтичане на пенни системи, съставени от различни по тип пенни филми. Резултатите показват че, при пенните системи, изградени с обикновени черни филми, в преходната зона филм/канал се блокира част от течността и тя не участва в изтичането. Направен е извода, че това явление води до по-бърз синерезис в сравнение с пените, изградени от нютонови филми, при които преходната зона е с пренебрежими размери и не влияе на скоростта на синерезис. Особено внимание в моделирането е отделено на параметрите, които обясняват зависимостта на синерезиса, както от типа на филма, така и от контактния ъгъл между филма и преходната зона. Теорията дава възможност за свързване на свойствата на филмите с промените в течното съдържание на пенни системи и с тяхната стабилност. По-нататъшното развитие на моделните изследвания в това направление ще позволи количествено охарактеризиране на пените и тяхната стабилност в различни случаи от приложно значение в хранителната, флотационната и обогатителната индустрия.

22 юни 2012  
София

д-р Любомир Николов: