Ужгород, 26-28 травня 2021 р.

ІЕФ-2021

Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів

МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Інститут електронної фізики
Національної академії наук України

National Academy of Sciences of Ukraine
Institute of Electron Physics

BOOK OF ABSTRACTS

International Conference of Young Scientists and Post-Graduate Students

IEP-2021

Uzhhorod, 26–28 May 2021

Інститут електронної фізики
Національної академії наук України

ІЕФ-2021

Міжнародна конференція
молодих учених та аспірантів

Ужгород, 26-28 травня 2021 р.

МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

BOOK OF ABSTRACTS

International Conference
of Young Scientists
and Post-Graduate Students

Uzhhorod, 26–28 May 2021

IEP-2021

Ужгород 2021

УДК 539.1
М 34

Збірник містить анотації до доповідей, представлених на Міжнародній конференції молодих учених та аспірантів ІЕФ-2021. Доповіді присвячені дослідженню явищ при електронних і атомних зіткненнях; елементарних процесів у лазерах і низькотемпературній плазмі; спектроскопії атомів, молекул, кристалів і невпорядкованих систем; нанотехнологій і наноструктур; матеріалів функціональної електроніки; ядерної фізики, радіаційної фізики і ядерної безпеки, радіоекології; теоретичної фізики.

The book includes abstracts of talks presented at the International Conference of Young Scientists and Post-Graduate Students IEP-2021. The talks are devoted to the studies of phenomena at electron and atomic collisions, elementary processes in lasers and low-temperature plasma, spectroscopy of atoms, molecules, crystals, and disordered systems, nanotechnology and nanostructures, materials for functional electronics, nuclear physics, radiation physics and nuclear safety, radioecology, and theoretical physics.

У к л а д а ч:

В.І. Роман, кандидат фізико-математичних наук

Відповідальні за випуск:

А.М. Завілопуло, доктор фізико-математичних наук, професор
Ю.М. Ажнюк, доктор фізико-математичних наук

© ІЕФ НАН України, 2021
© *В.І. Роман*, укладач, оригінал-макет, 2021

ISBN 978-617-7798-48-3

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА 14

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ 20

THEORETICAL STUDY OF ELECTRON-IMPACT IONIZATION IN ATOMS AND IONS 21

V.Jonauskas, A.Kynienė, Š.Masys, S.Kučas

Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Vilnius

BIG BANG PHYSICS 26

B.E.Zhilyaev

Main Astronomical Observatory of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv

ELECTRON IMPACT EXCITATION OF SINGLY CHARGED In ION 32

S.Bharti

Indian Institute of Technology Roorkee, Roorkee, India

NONLINEAR CRYSTAL $Sn_2P_2S_6$: METHODS OF MODIFICATIONS AND POTENTIAL APPLICATIONS 38

A.Grabar, M.Tsyhyka, A.Molnar, A.Kohutych, K.Glukhov, S.Hasynets, Yu.Vysochanskii

Institute for Solid State Physics and Chemistry of Uzhhorod National University, Uzhhorod

NANODIAMONDS PRODUCTION ON THE MICROTRON MT25 43

D.Chvatil, V.Olsansky, T.Kuda

Nuclear Physics Institute of the Czech Academy of Sciences, Czech Republic

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ СПЕКТРАЛЬНИХ КОЕФІЦІЄНТІВ ШАРУВАТИХ ОПТИЧНИХ СИСТЕМ 49

О.В.Міца, В.М.Рубіш, В.В.Красніков

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

ІЗОМЕРНІ ВІДНОШЕННЯ У РЕАКЦІЇ ^{121}Sb(γ,5n) ^{116m,g}Sb 54

В.І.Берест[1], О.А.Безшийко[1], О.М.Водін[2], Л.О.Голінка-Безшийко[1], І.М.Каденко[1], К.О.Крячок[1], В.А.Кушнір[2], В.В.Мітроченко[2], С.М.Олійник[2], С.А.Пережогін[2], C.Vallerand[3]

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ
[2]НДК "Прискорювач" ННЦ ХФТІ НАН України, Харків
[3]Laboratoire de l'Accélérateur Linéaire (LAL), Orsay, France

ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ СПІКАННЯ НА ЕЛЕКТРИЧНУ ПРОВІДНІСТЬ КЕРАМІКИ з ZnO 56

Є.М.Островерх[1], Л.Л.Коваленко[2], А.В.Самелюк[1], М.М.Бричевський[1], Н.О.Лисуненко[1], О.Д.Васильєв[1], А.С.Островерх[1]

[1]Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Київ
[2] Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України, Київ

КАТАЛІТИЧНИЙ ШАР ВОДНЕВОЇ ПАЛИВНОЇ КОМІРКИ 58

А.С.Островерх[1], М.Дубау[2], Є.М.Островерх[1]

[1]Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Київ
[2]Карлів університет, Прага

РОЗРАХУНОК ПЕРЕРІЗІВ ДВОЕЛЕКТРОННОГО ЗАХОПЛЕННЯ ПРИ ЗІТКНЕННІ АТОМІВ ГЕЛІЮ З АЛЬФА-ЧАСТИНКАМИ В РАМКАХ CDW-МЕТОДУ 60

В.В.Алексій, В.Ю.Лазур, С.І.Мигалина

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

ON THE FINE STRUCTURE OF THE DIFFRACTION CONE OF PROTON - PROTON AND ANTIPROTON - PROTON SCATTERING AT THE COLLIDER ENERGIES 62

N.Bence

Uzhhorod National University, Uzhhorod,

FIRST RESULTS OF ^{99m}Tc PRODUCTION IN ALL-UKRAINIAN CENTER FOR RADIOSURGERY 64

B.M.Bondar[1,2], B.Yu.Leshchenko[3], I.M.Kadenko[2], Ya.V.Kmetyuk[1]

[1]All-Ukrainian Center for Radiosurgery, Clinical Hospital «Feofaniya», Kyiv
[2]Department of Nuclear Physics, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv
[3]National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Kyiv

СВІЧЕННЯ ГЛІЦИНУ ПІД ДІЄЮ ЕЛЕКТРОНІВ 66

Й.Й.Брандіс, В.В.Кузьма, М.І.Шафраньош, А.М.Круцан, А.-М.С.Колесніченко, М.І.Суховія, І.Є.Митропольський, І.І.Шафраньош

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

ЗБУДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ МОЛЕКУЛ ВАЛІНА В ГАЗОВІЙ ФАЗІ 68

А.І.Булгакова, М.М.Ердевді, Ю.А.Бандурин

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

МАС-СПЕКТРОМЕТРІЯ МОЛЕКУЛ ВАЛІНУ ЕЛЕКТРОНАМИ В ГАЗОВІЙ ФАЗІ 70

А.І.Булгакова, А.М.Завілопуло

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

ТЕРМОХРОМНІ НАНО- ТА МІКРОКОМПОЗИТИ НА ОСНОВІ КРИСТАЛІВ $(NH_2(C_2H_5)_2)_2CuCl_4$ 72

Ю.Чорній, С.Семак, В.Капустяник

Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів

ТЕМПЕРАТУРНА ЕВОЛЮЦІЯ АБСОРБЦІЙНИХ СПЕКТРІВ СЕГНЕТОЕЛАСТОЕЛЕКТРИКА ТЕТРАХЛОРКУПРАТУ АМОНІЮ ДИГІДРАТУ 74

Ю.Чорній, В.Капустяник, С.Семак, М.Рудко, А.Васьків

Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів

FERROUS TO FERRIC TRANSITION IN Fe-PHTHALOCYANINE DRIVEN BY NO_2 EXPOSURE 76

I.Cojocariu[1], S.Carlotto[2], H.M.Sturmeit[3], G.Zamborlini[3], M.Cinchetti[3], A.Cossaro[4], A.Verdini[4], L.Floreano[4], M.Jugovac[1], P.Puschnig[5], C.Piamonteze[6], M.Casarin[2], V.Feyer[1], C.M.Schneider[1]

[1]Peter Grünberg Institute (PGI-6), Forschungszentrum Jülich GmbH, Jülich, Germany
[2] Dipartimento di Scienze Chimiche, Università degli Studi di Padova, Padova, Italy
[3] Technische Universität Dortmund, Experimentelle Physik VI, Dortmund, Germany
[4] CNR-IOM, Lab. TASC, Trieste, Italy
[5] Institute of Physics, University of Graz, NAWI Graz, Graz, Austria
[6] Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, Villigen PSI, Switzerland

ПРО ПОЗДОВЖНІ ЕЛЕКТРОМАГНІТНІ ХВИЛІ У ХВИЛЕВОДАХ, ПЛАЗМОНАХ, АНТЕНАХ І ЛАЗЕРНИХ ПУЧКАХ, ЩО ПЕРЕТИНАЮТЬСЯ 78

М.А.Гат'ян[1], В.М.Симулик[2], Т.М.Заяць[1]

[1]Інститут електронної фізики Національної академії наук України, Ужгород
[2]ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

COLLISIONAL EXCITATION OF NH_3 BY MOLECULAR HYDROGEN: CLOSE-COUPLING CALCULATIONS FOR HIGHER KINETIC TEMPERATURES 80

S.Demes and F.Lique

Institut de Physique de Rennes (IPR), Université de Rennes, Rennes, France

СТРУКТУРНІ, ЕЛЕКТРОННІ ТА ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ $CH_3NH_3PbBr_3$: РОЗРАХУНОК З ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ 82

М.Коваленко, О.Бовгира, О.Козаченко

Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів

АТОМНА СИСТЕМА ВАНАДІЮ: РОЗРАХУНОК СТРУКТУРИ 83

А.А.Кочемба, В.Ю.Лазур

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

ВПЛИВ ЛЕГУВАННЯ АТОМАМИ III ГРУПИ ЕЛЕМЕНТІВ НА ЕЛЕКТРОННУ СТРУКТУРУ ZnO 85

М.Коваленко[1], О.Бовгира[1], В. Дзіковський[1], А.Кашуба[2], Г.Ільчук[2], Р.Петрусь[2] І.Семків[2]

[1]Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів
[2]Національний університет «Львівська політехніка», Львів

ELECTRON INTERACTION WITH FREE AND CONFINED ATOMIC SYSTEMS 86

L.Sharma

Department of Physics, Indian Institute of Technology Roorkee, India

ВИЯВЛЕННЯ СЛІДІВ ЕНДОГЕННОГО АЦЕТОНУ ФЛУОРЕСЦЕНТНИМИ НАНОКОМПОЗИТАМИ АЕРОСИЛ-КУМАРИН 4 87

Я.П.Лазоренко, В.П.Міцай, А.Г.Мисюра

Інститут прикладних проблем фізики і біофизики НАН України, Київ

РОЗРОБКА ПРОСТОГО ЕФЕКТИВНОГО 2D ТЕЛЕСКОПА ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ МЮОНІВ КОСМІЧНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ 89

В.С.Лебедь, О.Б.Бацевич, О.А.Безшийко, Л.О.Голінка-Безшийко

Київський національний університет імені Тараса Шевченка (КНУТШ), Київ

СИНТЕЗ І ОПТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОЛОЇДНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК Ag–In–S 91

Б.В.Лопушанська

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

ФРАКТАЛЬНІ МОДЕЛІ В'ЯЗКОПРУЖНОСТІ СТЕКОЛ 92

Я.І.Лисаченко

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

ГЕНЕРАЦІЯ НЕЙТРОНІВ ГАЛЬМІВНИМИ ГАММА КВАНТАМИ 94

В.О.Мартишичкін[1], Є.А.Гарапко[1], І.І.Гайсак[1], Ж.Хушвактов[2], А.А.Солнишкін[2]

[1] *ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород*
[2]*Об'єднаний інститут ядерних досліджень, Дубна, Росія*

ДІЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СКЛОПОДІБНОГО СЕЛЕНУ ПОБЛИЗУ ТЕМПЕРАТУРИ КРИСТАЛІЗАЦІЇ 96

В.В.Мінькович, А.А.Горват

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

КОМПОЗИТНІ НАНОСТРУКТУРНІ ПЛІВКИ З ФЛУОРОФОРАМИ І КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ ДЛЯ ВИЯВЛЕННЯ ЛЕТКИХ МОЛЕКУЛ АМІАКУ 98

В.Міцай, Я.Лазоренко, А.Мисюра

Інститут прикладних проблем фізики і біофизики НАН України, Київ

DOMAIN WALL PECULIARITIES BELOW LOCK-IN PHASE TRANSITION IN $SN_2P_2SE_6$ SINGLE CRYSTALS 100

A.Sh.Molnar, O.O.Shpenik

Uzhhorod National University, Ukrainian Hungarian Educational Scientific Institute, Uzhhorod

РЕНТГЕНОЛЮМІНЕСЦЕНЦІЯ АРОМАТИЧНИХ АМІНОКИСЛОТ 102

І.Мошкола, Є.Світличний, В.Красилинець, О.Гомонай

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ПРИГОТУВАННЯ РЕГУЛЯРНИХ ТА НЕКЛАСИЧНИХ СПЛАВІВ Ar-Kr ПРИ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ 103

Н.С.Мисько-Крутік, А.О.Солодовнік

Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Вєркіна НАН України, Харків

ЕНЕРГЕТИЧНА ХАРАКТЕРИСТИКА ПЛАЗМОВОГО ПОТОКУ У ПРИСКОРЮВАЧІ З ВІДКРИТИМИ СТІНКАМИ 105

І.В.Найко, О.А.Гончаров, А.М.Добровольський, В.Ю.Баженов

Інститут фізики НАН України, Київ

PROTON IMAGING WITH PIXEL DETECTOR TIMEPIX3 AT TANDETRON ACCELERATOR 107

V.Olšanský[1, 3], C.Granja[2], A.Macková[1], C.Oancea[2], V.Havránek[1], D.Chvátil[1], J.Bíla[3]

[1] Nuclear Physics Institute CAS p.r.i., Řež near Prague, Czech Republic
[2]ADVACAM, Prague, Czech Republic
[3] Department of Instrumentation and Control Engineering, Czech Technical University in Prague, Czech Republic

He NANODROPLETS AS A UNIQUE QUANTUM CELL FOR FUNDAMENTAL PHYSICS RESEARCH 109

Y.Ovcharenko

European XFEL GmbH, Schenefeld, Germany

ВИЗНАЧЕННЯ ІЗОМЕРНОГО ВІДНОШЕННЯ ВИХОДІВ ПРОДУКТІВ ВИСОКОПОРОГОВИХ ФОТОЯДЕРНИХ РЕАКЦІЙ З ЗАРЯДЖЕНОЮ ЧАСТИНКОЮ У ВИХІДНОМУ КАНАЛІ 111

О.А.Безшийко[1], О.М.Водін[2], Л.О.Голінка-Безшийко[1], І.М.Каденко[1], К.О.Крячок[1], В.А.Кушнір[2], В.В.Мітроченко[2], С.М.Олійник[2], П.В.Палінічак, С.А.Пережогін[2], C.Vallerand[3]

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ
[2]НДК "Прискорювач" ННЦ ХФТІ НАН України, Харків
[3]Laboratoire de l'Accélérateur Linéaire (LAL), Orsay, France

AN INVESTIGATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF NITROGEN CONTAINING HETEROCYCLES BY SYNCHROTRON-BASED SPECTROSCOPIC TECHNIQUES 113

O.Plekan[1], C.Callegari[1], M.Di Fraia[1], K.C.Prince[1], R.Richter[1], H.Sa'adeh[2], A.Ciavardini[3], M.Devetta[4], D.Facciàlà[4], C.Vozzi[4], L.Avaldi[5], P.Bolognesi[5], M.C.Castrovilli[5], D.Catone[6], M.Coreno[6], E.Bernes[7], G.Fronzoni[7], D.Toffoli[7], and A.Ponzi[8]

[1]Elettra Sincrotrone Trieste, Area Science Park, Basovizza, Trieste, Italy,
[2]Department of Physics, The University of Jordan, Amman, Jordan,
[3]University of Nova Gorica, Ajdovščina, Slovenia,
[4]CNR-Istituto di Fotonica e Nanotecnologie, (CNR-IFN), Milano, Italy,
[5]CNR-Istituto di Struttura della Materia (CNR-ISM), Monterotondo Scalo, Italy,
[6]CNR-Istituto di Struttura Della Materia (CNR-ISM), Rome, Italy,
[7]Dipartimento di Scienze Chimiche, Università degli Studi di Trieste, Trieste, Italy,
[8]Institut Ruđer Bošković, Zagreb, Croatia.

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ОПРОМІНЕННЯ ЕЛЕКТРОННИМИ ПУЧКАМИ НА ПОКАЗИ МІДЬ-КОНСТАНТАНОВОЇ ТЕРМОПАРИ 115

І.Г.Мегела, О.М.Поп

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

АСИМПТОТИЧНА ТЕОРІЯ ЗАРЯДОВОГО ОБМІНУ МІЖ ДИПОЛЬНО-ЗВ'ЯЗАНИМИ АНІОНАМИ ТА ПОЛЯРНИМИ МОЛЕКУЛАМИ 116

В.Р.Євич, М.В.Поп, М.Я.Євич, М.І.Карбованець

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

СИМУЛЯЦІЯ ПАРАМЕТРІВ ПУЧКІВ ГАЛЬМІВНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ ПРИ ВЗАЄМОДІЇ ЕЛЕКТРОНІВ З ТАНТАЛОВИМ КОНВЕРТЕРОМ НА МІКРОТРОНІ М-30 117

І.В.Пилипчинець, Є.В.Олейніков, О.О.Парлаг, О.І.Лендєл

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

X-RAY LUMINESCENCE SPECTRA OF UNDOPED Ga_2O_3 CRYSTAL 119

M.Rudko[1], V.Kapustianyk[1], V.Mykhailyk[2]

[1]*Ivan Franko Lviv National University, Lviv*
[2]*Diamond Light Source, Harwell Campus, Didcot, UK*

THERMOACTIVATED HEAT TRANSFER MECHANISM IN DYNAMICALLY ORIENTATIONALLY DISORDERED (DOD) PHASE OF 1,1-DIFLUOROETHANE 121

V.V.Sagan, V.A.Konstantinov, A.I.Krivchikov, A.V.Karachevtseva

B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkiv

ЛЮМІНЕСЦЕНЦІЯ МОЛЕКУЛ ЦИТОЗИНУ РІЗНИМИ СПОСОБАМИ ЗБУДЖЕННЯ 122

В.Ю.Шпеник, М.І.Шафраньош, Б.М.Маргітич, М.І.Суховія, Ш.Б.Молнар, О.О.Шпеник, І.І. Шафраньош

Ужгородський національний університет, Ужгород

ДОСЛІДЖЕННЯ ХІМІКО-ФІЗИЧНИХ ТА БІОЛОГІЧНИХ ЕВОЛЮЦІЙНИХ ЗМІН ПОКАЗНИКІВ ВОДИ ТА РОЗЧИНІВ ГЛЮКОЗИ/САХАРОЗИ, ОПРОМІНЕНОЇ НА МІКРОТРОНІ М-30 З ЕНЕРГІЄЮ 12,5 МЕВ 123

Н.І.Сватюк[1], Н.В.Бойко[2],О.І.Симканич[2], С.А.Тимощук, О.М.Поп[1], О.М.Турховський[1], О.А.Тарнай[1], О.О.Грабар[2], В.Т.Маслюк[1]

[1]*Інститут електронної фізики Національної академії наук України, Ужгород*
[2]*ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород*

ОСОБЛИВОСТІ РЕНГЕНОЛЮМІНЕСЦЕНТНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК, ОПРОМІНЕНИХ НА МІКРОТРОНІ М-30 125

О.І.Симканич[1], В.М.Красилинець[2], А.М.Соломон [2], Н.І.Сватюк[1], В.Т.Маслюк[1], Г.Ф.Пітченко[1]

[1]ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
[2]Інститут електронної фізики Національної академії наук України, Ужгород

ДОСЛІДЖЕННЯ ВМІСТУ РАДІОНУКЛІДІВ У ВОДНО-ҐРУНТОВОМУ КОМПЛЕКСІ ТЕРИТОРІЇ БАСЕЙНУ р. ТИСА 127

Н.І.Сватюк[1], О.М.Поп[1] , В.І.Роман[1], О.І.Симканич[2], І.В.Пилипчинець[1], Е.В.Олейніков

[1]Інститут електронної фізики Національної академії наук України, Ужгород
[2]ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

ЕФЕКТИВНІ ПЕРЕРІЗИ ФРАГМЕНТАЦІЇ ЯДРА ПЛУТОНІЮ-239 ПРИ ОПРОМІНЕННІ ПРОТОНАМИ 660 МеВ 129

А.М.Танчак[1,2], І.І.Гайсак[1], К.Катовскі[2], Р.Р.Голомб[1,2]

[1]Ужгородський національний університет, Ужгород
[2]Технологічний університет Брно, Брно, Чехія

УНІТАРНІСТЬ І ВИРІШЕННЯ ПРОБЛЕМИ ФІНКЕЛЬШТЕЙНА — КАЙАНТІ У ДИФРАКЦІЙНОМУ НАРОДЖЕННІ АДРОНІВ 131

Г.С.Терсімонов, Є.С.Мартинов

Інститут теоретичної фізики імені М.М.Боголюбова НАН України, Київ

ВПЛИВ РАДІАЦІЙНО-МОДИФІКОВАНИХ НА МІКРОТРОНІ М-30 (12,5 МеВ) СПИРТОВИХ РОЗЧИНІВ НА ПРОБІОТИЧНІ МІКРООРГАНІЗМИ 132

С.А.Тимощук[1], В.Т.Маслюк[2], Н.В.Бойко[1]

[1]ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
[2]Інститут електронної фізики Національної академії наук України, Ужгород

ТЕЧІЯ КУЕТТА МІЖ ДВОМА КОАКСИАЛЬНИМИ ОБОЛОНКАМИ 134

О.О.Усатова

Інститут проблем машинобудування ім. А.М. Підгорного НАН України, Київ

ПРУЖНЕ РОЗСІЮВАННЯ ЕЛЕКТРОНА НА МОЛЕКУЛІ АМІНОКИСЛОТИ ТРЕОНІНУ 136

Ш.Ш.Демеш[1], О.В.Васильєв[2], Є.Ю.Ремета[2]

[1]Institute for Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen, Hungary
[2]Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

ОДНОКРАТНА ІОНІЗАЦІЯ МОЛЕКУЛИ АМІНОКИСЛОТИ ВАЛІНУ 138

О.В.Васильєв[1], Ш.Ш.Демеш[2], А.І.Булгакова[1], Є.Ю.Ремета[1]

[1]Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
[2]Institute for Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen, Hungary

ОДНОКРАТНА ІОНІЗАЦІЯ АМІНОКИСЛОТ ТРЕОНІНУ ТА ТИРОЗИНУ 140

О.В.Васильєв[1], Ш.Ш.Демеш[2], Є.Ю.Ремета[1]

[1]Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
[2]Institute for Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen, Hungary

ОДНОКРАТНА ІОНІЗАЦІЯ СКЛАДНИХ БІОМОЛЕКУЛ 142

О.В.Васильєв[1], Ш.Ш.Демеш[2], Е.Ю.Ремета[1]

[1]Institute for Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen, Hungary
[2]Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна

СПЕКТРОСКОПІЯ МІЖЗОРЯНОГО СЕРЕДОВИЩА ЗА ДОПОМОГОЮ НИЗЬКОЧАСТОТНИХ РЕКОМБІНАЦІЙНИХ РАДІОЛІНІЙ ВУГЛЕЦЮ. ВЕЛИКОМАСШТАБНИЙ ОГЛЯД ГАЛАКТИКИ НА РАДІОТЕЛЕСКОПІ УТР-2 144

Є.В.Васильківський, О.О.Коноваленко, С.В.Степкін

Радіоастрономічний інститут НАН України, Харків

ХАРАКТЕРИСТИКИ І ПАРАМЕТРИ ПЕРЕНАПРУЖЕНОГО НАНОСЕКУНДНОГО РОЗРЯДУ МІЖ МІДНИМИ ЕЛЕКТРОДАМИ В АРГОНІ 146

М.І.Ватрала, А.О.Малініна, Р.В.Грицак, О.К.Шуаібов

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

СПЕКТРАЛЬНІ ХАРАКТЕРТИСТИКИ ПЕРЕНАПРУЖЕНОГО НАНОСЕКУНДНОГО РОЗРЯДУ В ГАЗО-ПАРОВІЙ СУМІШІ «КИСЕНЬ-ЦИНК» 148

М.І.Ватрала, Р.В.Грицак, А.О.Малініна, О.О.Кудін, О.К.Шуаібов

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

РОЗРАХУНОК ВЛАСТИВОСТЕЙ ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ АТОМІВ ФОСФОРУ ТА СІРКИ 150

О.В.Єгіазарян., В.Ю.Лазур, В.Ф.Гедеон, С.В.Гедеон., Н.Ю.Березницька

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

NEAR-FIELD FUNDAMENTALS AND APPLICATIONS OF PHOTONIC ANISOTROPIC METASURFACES 152

O.Yermakov

Department of Computer Physics, V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv

ПРО РЕЛЯТИВІСТСЬКІ РІВНЯННЯ РУХУ ПЕРШОГО ПОРЯДКУ ДЛЯ ЕЛЕМЕНТАРНОЇ ЧАСТИНКИ ЗІ СПІНОМ 3/2 154

І.І.Вийконь, В.М.Симулик

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

ВПЛИВ ДЕФЕКТІВ НА ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІВ $CuInP_2S_6$ 156

А.Гайсак, Д.Гал, О.Молнар

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

ДОСЛІДЖЕННЯ ПЕРЕРІЗУ ФОТОЯДЕРНОЇ РЕАКЦІЇ $^{122}Te(\gamma,n)^{121}Te$ В РАЙОНІ ГІГАНТСЬКОГО Е1-РЕЗОНАНСУ 158

З.М.Біган, П.С.Деречкей, В.М.Мазур, О.М.Поп

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

КОМПОЗИЦІЙНІ МАТЕРІАЛИ ІЗ ПОРОШКОВИМ МЕТАЛОВМІСНИМ НАПОВНЮВАЧЕМ ДЛЯ ЗАХИСТУ ВІД НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ 159

В.Іванов, Е.Клюєв, Є.Степаненков

Інститут геотехнічної механіки ім. М.С. Полякова НАН України, Дніпро

ПАРАМЕТРИ ГАЗОРОЗРЯДНОЇ ПЛАЗМИ НА СУМІШІ ПАРІВ ДИЙОДИДУ, ДИБРОМІДУ І ДИХЛОРИДУ РТУТІ З ГЕЛІЄМ 161

А.О.Малініна, К.Б.Молнар

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

МАТРИЧНИЙ ЕЛЕМЕНТ ПЕРЕДАЧІ КВАНТОВОЇ ІНФОРМАЦІЇ ВІД ОДНОГО ДВОРІВНЕВОГО АТОМА ДО ІНШОГО 163

С.М. Кузьма, В.Ю.Лазур, О.К.Рейтій, В.В.Рубіш

ДВНЗ "Ужгородський національний університет", Ужгород

ВПЛИВ ВІЗЕРУНКУ ЗАПОВНЕННЯ ВНУТРІШНЬОГО ОБ'ЄМУ ПЛАСТИКОВОГО БРУСКА НА ПОКАЗНИКИ МЕЖІ МІЦНОСТІ 165

А.Я.Михалко[1], О.О.Гомоннай[2]

[1]*Мала Академія Наук, Ужгород*
[2]*ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород*

ПОРІВНЯННЯ ПІДХОДІВ ДО АНАЛІЗУ НАКЛАДЕНИХ ПОДІЙ В ЕКСПЕРИМЕНТІ AMoRE 167

Н.В.Сокур

Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ

ДОСЛІДЖЕННЯ ПОДВІЙНОГО БЕТА-РОЗПАДУ ЯДРА ^{106}Cd З ВИКОРИСТАННЯМ КРИСТАЛУ $^{106}CdWO_4$ 168

В.Р.Клавдієнко[1], П.Беллі[2,3], Р.Бернабей[2,3], Ф.А.Даневич[1], А.Інчікітті[4,5], Ф.Капелла[4] , В.Карачіоло[5], Д.В.Касперович[1], В.В.Кобичев[1], А.Леончіні[6], В.Мерло[2,3], О.Г.Поліщук[1], В.І.Третяк[1], Р.Черуллі[2,3]

[1]*Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ*
[2]*Національний інститут ядерної фізики, відділення у Римі "Тор Вергата", Рим*
[3]*Римський університет "Тор Вергата", Рим*
[4]*Національний інститут ядерної фізики, відділення у Римі "Ла Сапієнца", Рим*
[5]*Національна лабораторія Гран Сассо, Ассерджі*
[6]*Римський університет "Ла Сапієнца", Рим*

ТОНКА СТРУКТУРА НИЗЬКОЧАСТОТНИХ РАМАН СПЕКТРІВ ХАЛЬКОГЕНІДНИХ СТЕКОЛ В ОБЛАСТІ БОЗОННОГО ПІКУ 170

Р.М.Голомб, Д.О.Гевці, В.М.Міца

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород

ВПЛИВ ЕНЕРГІЇ ЗБУДЖЕННЯ НА ФОРМУВАННЯ ПОСТ-НЕЙТРОННИХ ВИХОДІВ ПРОДУКТІВ ПОДІЛУ ІЗОТОПІВ ТОРІЮ В ОБЛАСТІ ЕНЕРГІЙ ПЕРШОГО ШАНСУ 171

Є.В.Олейніков, І.В.Пилипчинець, О.І.Лендєл, О.О.Парлаг

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

РОЗРАХУНКИ ПЕРЕРІЗІВ ЗБУДЖЕННЯ $3p^6$ ТА $3s^2$ ОБОЛОНОК АТОМА КАЛІЮ 173

В.І.Роман

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

ПЕРЕДМОВА

Стрімкий розвиток технологій спричиняє швидкі зміни у нашому житті, причому темп цих змін постійно прискорюється. Основною рушійною силою такого прогресу є наукові досягнення, важливість яких на тлі коронавірусної пандемії в останні два роки набула зовсім іншого розуміння у суспільстві. Зараз, як ніколи, прийшло усвідомлення того, що без науки ми безпорадні, а тому найбільшу цінність має високий рівень інтелекту та фахової підготовки, працездатність та сумлінність наукової спільноти. Незважаючи на багаторічні труднощі й перешкоди, українська наука, що тримається значною мірою на ентузіастах, у переважній кількості галузей продовжує гідно конкурувати з провідними закордонними науковими лабораторіями. Наприклад, авторитетні позиції України в галузі фізики визнаються світовою науковою спільнотою. Своє гідне місце у багатьох позиціях займає й єдина на Закарпатті академічна установа – Інститут електронної фізики НАН України. Це провідна наукова установа, в якій проводяться наукові дослідження з актуальних проблем фізики фотонних, електронних, іонних та атомних зіткнень, низькоенергетичної ядерної фізики, радіаційної і техногенно-екологічної безпеки, фізико-хімічних основ і технології отримання, оброблення та застосування макроскопічних і мезоскопічних кристалів, плівок та склоподібних матеріалів.

Результати досліджень співробітників інституту отримали визнання наукової громадськості України, багатьох зарубіжних установ і вчених та відзначені чотирма Державними преміями України у галузі науки і техніки (з атомної фізики; ядерної фізики; хімії, технології і матеріалознавства; наноструктур) та чотирма преміями НАН України імені видатних учених (К.Д. Синельникова (1994 р.), В.Є. Лашкарьова (2001 р.), І. Пулюя (2002 р. та 2011 р.). Щороку робота трьох молодих учених Інституту підтримується стипендіями Президента України та НАН України. Протягом багатьох років наші молоді науковці виграють гранти для підтримки наукових досліджень, стають лауреатами премій НАН України, Верховної Ради України для молодих учених. Приємно зазначити, що молоді вчені – вихованці Інституту електронної фізики НАН України – успішно представляють українську науку за кордоном, працюючи у провідних наукових закладах Франції, Італії, Німеччини, Данії, Чехії, Угорщини, США і разом з тим продовжують співпрацювати з рідним інститутом. Це, зокрема, доктори філософії Віталій Фейєр, Оксана Плекан, Аттіла Немет, Євген Овчаренко, Володимир Маслюк, Дмитро Симочко, Шандор Демеш.

Важливим для молоді було і залишається проведення на базі Інституту електронної фізики впродовж 20 років Міжнародної конференції молодих учених та аспірантів «ІЕФ», яка викликає жвавий інтерес у наукової молоді різних наукових установ України та зарубіжжя. Ця наукова конференція стала однією з важливих форм висвітлення підсумків наукової роботи, пов'язаної з проведенням студентами та аспірантами наукових досліджень, підготовкою магістерських проєктів і дисертацій. Крім того, вона є ефективним засобом вияву обдарованої молоді, реалізації набутих ними здібностей, активізації навчально-пізнавальної діяльності, обміну досвідом.

26–28 травня 2021 року в інституті проводитиметься чергова конференція «ІЕФ-2021», цього разу в дещо особливій формі у порівнянні з попередніми. Оскільки весь світ ще й досі бореться з коронавірусною хворобою, цьогоріч конференцію «ІЕФ-2021» буде проведено в режимі онлайн. Приємно зазначити, що цікавість до конференції від цього не згасла, а навпаки, розширила географію учасників. Для участі у цьогорічній конференції було надіслано 72 заявки від понад 250 співавторів з наукових установ та вищих навчальних закладів Києва, Харкова, Дніпра, Львова, Ужгорода, а також з Праги, Брна (Чехія), Вільнюса (Литва), Руркі (Індія), Дебрецена (Угорщина), Юліха, Дортмунда, Шенефельда (Німеччина), Рима, Трієста, Ассерджі, Мілана, Падуї (Італія), Орсе, Ренна (Франція), Граца (Австрія), Філлігена (Швейцарія), Айдовщини (Словенія), Аммана (Йорданія), Загреба (Хорватія), Дідкота (Великобританія). Судячи з тез, які надійшли до оргкомітету, відбувається інтенсивний процес міжнародної колаборації за участі молодих науковців з найактуальніших проблем сучасної фізики з таких наукових напрямів:

- *фізика електронних і атомних зіткнень;*
- *елементарні процеси у лазерах і низькотемпературній плазмі;*
- *спектроскопія атомів, молекул (у т. ч. біомолекул), кристалів і невпорядкованих систем;*
- *нанотехнології і наноструктури;*
- *технологія одержання, властивості та застосування матеріалів функціональної електроніки;*
- *ядерна фізика, радіаційна фізика і ядерна безпека, радіоекологія;*
- *теоретична фізика.*

Вже декілька років у рамках конференції проводяться майстер-класи для молодих учених, на яких заслуховуються лекції провідних вітчизняних та зарубіжних вчених. Для участі в роботі конференції «ІЕФ-2021» спікерами оглядових лекцій з найактуальніших напрямів науки і техніки запрошено провідних фахівців поважних наукових установ з Києва, Ужгорода, а також з Праги, Вільнюса та Руркі.

Варто зазначити, що у підготовці та проведенні конференції «ІЕФ-2021» велику підтримку надали як Національна академія наук України, так і

представники органів державної влади та бізнесу, які добре розуміють роль молодих науковців у розвитку сучасної національної науки, освіти, культури, самосвідомості в суперечливих та складних умовах європейської інтеграції. Оргкомітет конференції висловлює щиру вдячність Президії Національної академії наук України, Департаменту освіти і науки, молоді та спорту облдержадміністрації Закарпатської області, будівельній фірмі «Gazda» (Ужгород), а також усім, хто взяв участь в організації та проведенні конференції, надав допомогу і підтримку в підготовці цього важливого заходу.

Від щирого серця бажаю всім учасникам конференції «ІЕФ-2021» достойно представити свої наукові здобутки, налагодити нові зв'язки та створити тісні наукові колаборації, зичу плідної роботи, позитивних вражень, невичерпної енергії та творчих успіхів в ім'я міжнародної науки.

Вікторія Роман
голова організаційного комітету,
кандидат фіз.-мат. наук

Організаційний комітет

Голова оргкомітету
к.ф.-м.н. **В.І. Роман**

Заступник голови оргкомітету
к.ф.-м.н. **О.М. Поп**

Секретар оргкомітету
Є.В. Олейніков

Члени оргкомітету
к.ф.-м.н. **О.І. Гомонай**
к.ф.-м.н. **О.О. Парлаг**
к.ф.-м.н. **Т.Ю. Попик**
к.т.н. **Н.І. Сватюк**
А.М. Милимко
А.І. Булгакова
І.Ю. Мошкола

Програмний комітет

Голова програмного комітету
д.ф.-м.н. **Г.М. Гомонай**

Заступник голови програмного комітету
д.ф.-м.н. **А.М. Завілопуло**

Секретар програмного комітету
О.В. Васильєв

Члени програмного комітету
д.ф.-м.н. **О.В. Снігурський** (Україна)
д.ф.-м.н. **О.В. Гомоннай** (Україна)
д.ф.-м.н. **В.Т. Маслюк** (Україна)
д.ф.-м.н. **Є.Ю. Ремета** (Україна)
д.ф.-м.н. **Ю.М. Ажнюк** (Україна)
проф. **І. Фабрикант** (США)
др. **В. Йонаускас** (Литва)
к.ф.-м.н. **В. Феєр** (Італія)
к.ф.-м.н. **А. Немет** (Угорщина)
к.ф.-м.н. **О. Плекан** (Італія)

PREFACE

Bustling development of technology leads to rapid changes in our life accelerating with ever increasing speed. This progress is mainly driven by scientific achievements, the importance of which is understood much deeper by the society in the current time of the coronavirus pandemic. More than ever before, today we realize how helpless mankind is without science and that is why high intellectual and professional level as well as work qualification and conscientiousness of the scientific community are so much appreciated. In spite of long-time problems and obstacles, Ukrainian science, driven to a great extent by enthusiasts, continues to compete with leading world scientific laboratories. For example, achievements of Ukrainian physicists are highly recognized by the world scientific community. A decent place in many positions belongs to the only academic institution in Transcarpathia – Institute of Electron Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine. Here we perform research in current problems of physics of photon, electron, ionic, and atomic collisions, low-energy nuclear physics, radiation- and technology-related environmental safety, physical and chemical fundamentals and technology of fabrication, processing, and application of macroscopic and mesoscopic crystals as well as films and glasses.

The results of the research performed in the institute are recognized by the Ukrainian scientific community, many foreign institutions and researchers. The employees of the institute have been awarded four State Prizes of Ukraine in Science and Technology (in the fields of atomic physics, nuclear physics, chemistry and materials science, and nanostructures) and four prizes of the National Academy of Sciences of Ukraine: the Synelnykov Prize (1994), the Lashkaryov Prize (2001), and the Pului Prize (2002 and 2011). Each year three young scientists of the institute are supported by scholarships of the President of Ukraine and of the National Academy of Sciences of Ukraine. For many years our young researchers have been winning scientific grant competitions and awards of the National Academy of Sciences of Ukraine and the Supreme Council of Ukraine for young scientists. It is my pleasure to note that the alumni of the Institute of Electron Physics successfully represent Ukrainian science abroad, working in top research institutions of France, Italy, Germany, Denmark, Czechia, Hungary, the USA and simultaneously continuing to collaborate with their home institute. This concerns, in particular, Dr. Vitaliy Feyer, Dr. Oksana Plekan, Dr. Attila Nemeth, Dr. Yevhen Ovcharenko, Dr. Volodymyr Maslyuk, Dr. Dmytro Symochko, and Dr. Sándor Demes.

An important event for the institute is International Conference of Young Scientists and Post-Graduate Students which is being held here for 20 years and

causes stirring interest among the Ukrainian and foreign young researchers. This conference has become an important forum to present the results of research performed by students challenging for their M.Sc. and Ph.D. degrees. Besides, it is an efficient way to reveal gifted young people, to let them share their results and exchange experience.

On the 26–28 May 2021 the institute will host the IEP-2021 conference, this time in a specific way, different from the preceding ones. As the world is still struggling against the coronavirus disease, the IEP-2021 conference will be held online. It is a pleasure to note that this did not reduce the interest towards the conference, but, on the contrary, extended the geography of participants. The organizers received 72 applications for participation in the conference from over 250 co-authors from scientific institutions and universities of Kyiv, Kharkiv, Dnipro, Lviv, Uzhhorod as well as Prague and Brno (the Czech Republic), Vilnius (Lithuania), Roorkee (India), Debrecen (Hungary), Jülich, Dortmund, and Schenefeld (Germany), Rome, Trieste, Assergi, Milan, and Padova (Italy), Orsay and Rennes (France), Graz (Austria), Villigen (Switzerland), Ajdovščina (Slovenia), Amman (Jordan), Zagreb (Croatia), Didcot (Great Britain). As follows from the abstracts, young researchers participate in intense international collaboration in current problems of the following topics of modern physics:

- *physics of electron and atomic collisions,*
- *elementary processes in lasers and low-temperature plasma,*
- *spectroscopy of atoms, molecules (including biomolecules), crystals, and disordered systems,*
- *nanotechnology and nanostructures,*
- *technology, properties, and applications of materials for functional electronics,*
- *nuclear physics, radiation physics, nuclear safety, radioecology,*
- *theoretical physics.*

In the recent years the programme of our conferences includes invited lectures of renowned Ukrainian and foreign scientists. At the IEP-2021 conference, invited lectures in current problems of science and technology will be given by leading researchers from Kyiv and Uzhhorod as well as Prague, Vilnius, and Roorkee.

It is worth notice that valuable support for the preparation and organizing the IEP-2021 conference was provided by the the National Academy of Sciences of Ukraine as well as representatives of regional authorities and business who are well aware of the role of young scientists in the development of modern national science, culture, and identity in complex and contradictory circumstances of European integration. The Organizing Committee expresses our deep gratitude to the Presidium of the National Academy of Sciences of Ukraine, to the Department for Education Science, Youth, and Sports of Transcarpathian Regional Administration, to *Gazda* corporation (Uzhhorod) as well as to all those people who participated in the preparation and organizing the IEP-2021 conference, provided assistance and support in its preparation.

From the bottom of my heart I wish all the participants of the IEP-2021 conference successful presentation of their scientific results, finding new connections and establishing new scientific collaboration, fruitful work, good impressions, inexhaustible energy, and success in the development of international science.

Dr. Viktoria Roman,
Chair of the Organizing Committee

Organizing Committee

Chair:
Dr. **V.I. Roman**

Vice-chair:
Dr. **O.M. Pop**

Secretary:
Y.V. Oleinikov

Members:
Dr. **A.I. Gomonai**
Dr. **O.O. Parlag**
Dr. **T.Y. Popik**
Dr. **N.I. Svatyuk**
A.M. Mylymko
A.I. Bulgakova
I.Y. Moshkola

Programme Committee

Chair:
Dr. **A.M. Gomonai**

Vice-chair:
Prof. **A.M. Zavilopulo**

Secretary:
O.V. Vasyliev

Members:
Prof. **A.V. Snegursky** (Ukraine)
Prof. **A.V. Gomonnai** (Ukraine)
Prof. **V.T. Maslyuk** (Ukraine)
Prof. **E.Y. Remeta** (Ukraine)
Dr. **Y.M. Azhniuk** (Ukraine)
Prof. **I. Fabrikant** (USA)
Dr. **V. Jonauskas** (Lithuania)
Dr. **V. Feyer** (Italy)
Dr. **A. Nemeth** (Hungary)
Dr. **O. Plekan** (Italy)

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

ABSTRACTS

THEORETICAL STUDY OF ELECTRON-IMPACT IONIZATION IN ATOMS AND IONS

V.Jonauskas, A.Kynienė, Š.Masys, S.Kučas

Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Vilnius, Lithuania
e-mail: valdas.jonauskas@tfai.vu.lt

The fourth state of matter attracts considerable interest since the development of thermonuclear fusion research. The properties of plasma are mainly defined by its atomic constituents and interaction among them. The better knowledge of the underlying atomic collisional processes is an urgent necessity. Relative intensities of emission lines in the plasma spectra depend on the charge state distribution. Recombination and ionization processes determine charge state distribution in the collisional plasma. Electron impact ionization is one of the fundamental processes that define the interaction of the electrons with matter. The exterior complex scaling [1], convergent close coupling [2], R-matrix with pseudo-states [3], and time-dependent close-coupling [4] methods have been developed to investigate the electron-impact single ionization. However, such studies are often limited to the simple atomic systems and are time consuming or even beyond the capabilities of available computational resources. On the other hand, the studies using the distorted wave (DW) approximation provide reliable data for many ions. Previous calculations using the configuration average DW method demonstrated good agreement with experimental data [5, 6, 7]. Level-to-level study is required when the excited configurations produced by the electron impact have energy levels that straddle the single ionization threshold. Furthermore, the ionization cross sections can strongly depend on the level of the initial configuration [8].

We will review the main topics that are important in the theoretical studies of the electron-impact single ionization.

Single ionization by electron impact includes direct and indirect processes:

$$\sigma_{ij}(\varepsilon) = \sigma_{ij}^{\mathrm{DI}}(\varepsilon) + \sum_k \sigma_{ik}^{\mathrm{EXC}}(\varepsilon) B_{kj}\,, \qquad (1)$$

where $\sigma_{ij}^{\mathrm{DI}}(\varepsilon)$ is the direct ionization (DI) cross section at electron energy ε, $\sigma_{ik}^{\mathrm{EXC}}$ is the electron-impact excitation cross section, and the branching ratio is defined by the expression:

$$B_{kj} = \frac{A_{kj}^{a} + \sum_n A_{kn}^{r} B_{nj}}{\sum_m A_{km}^{a} + \sum_n A_{kn}^{r}}\,. \qquad (2)$$

A_{kj}^{a} and A_{kn}^{r} is Auger and radiative transition probabilities, respectively. The second term in the numerator defines the decay to the final level j through the intermediate levels n reached by the radiative transition from the initial excited level k. This higher-order term is often not included in the calculations since its full treatment would drastically increase the computational effort.

It is well known that the DW approximation often overestimates the single-ionization cross sections for neutral atoms and near neutral ions. Previously, the binary-encounter-dipole (BED) and binary-encounter-Bethe (BEB) models were developed for the direct process to deal with these ionization stages [9]. These models, with the scaled plane-wave-Born cross sections, demonstrated a good agreement with experimental data [10, 11]. It was suggested to use the scaled DW cross sections for the atoms and low-ionization ions [12]. The scaled DW cross sections for the collisional ionization are expressed by the following equation:

$$\sigma_{ij}^{\mathrm{DI}*}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + I}\sigma_{ij}^{\mathrm{DI}}(\varepsilon)\,, \tag{3}$$

where I is the ionization energy. The scaled cross sections for the electron-impact excitation are expressed by the following equation [12, 13]

$$\sigma_{ik}^{\mathrm{EXC}*}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + \Delta E_{ik} + \varepsilon_b}\sigma_{ik}^{\mathrm{EXC}}(\varepsilon)\,, \tag{4}$$

where ε_b is a binding energy of the electron, ΔE_{ik} is a transition energy. Thus, all DW cross sections calculated for electron-impact excitation are scaled.

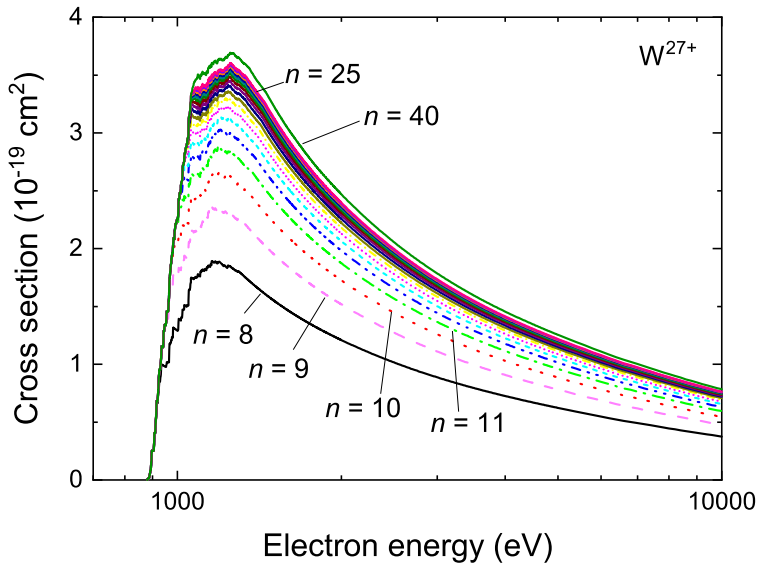


Fig. 1. Accumulated cross sections of the EA channels contributing to the ionization from the ground level of $\mathbf{W}^{27+}$. The EA channels correspond to excitations to shells with a different principal quantum number.

Study of the excitation-autoionization (EA) process has to ensure convergence for the cross sections of excitation by electron impact. It was demonstrated for tungsten ions with the open 4f subshell in the ground configuration that the excitations up to shells with the principal quantum number $n = 40$ have to be investigated to provide the reliable data for the electron-impact ionization cross sections. In addition, a dominating contribution from the excitations to shells with orbital quantum number $l = 3$ appeared on the scene. It should be noted that the excitations to the $l = 3$ orbital were insignificant for the lower ionization stages of tungsten: W^{4+} – W^{6+} [5, 14]. Figure 1 demonstrates that the high-n excitations are important for the EA process in the W^{27+} ion. The excitations to shells with $9 \le n \le 40$ contribute $\sim 50\%$ to the indirect ionization.

The produced configurations in the direct process of electron impact ionization with energy levels above the double ionization threshold often can decay to the next ionization stage leading to the double ionization. The branching ratios define what part of population is transferred to the next ionization stage from the autoionizing configurations. What is more, the configurations produced by electron impact excitation above the double ionization threshold require a separate analysis since not all population from these configurations reaches the states of the doubly ionized ions. Studies for the Fe^{8+} ion demonstrated that these configurations can contribute to single ionization process [15]. The Fe^{8+} $2p^5 3s^2 3p^6 3d$ configuration corresponding to the strongest excitation from the $2p$ subshell reaches only the states of the Fe^{9+} ion through Auger transitions.

Interaction of electron with an ion can lead to capture of the electron with an excitation of the bound electron producing an atomic system in the lower ionization stage compared to the initial one. The formed autoionizing configuration can decay through Auger cascade to states of the next ionization stage compared to the initial one leading to the single ionization process. Figure 2 shows contribution of the resonant excitation double autoionization (REDA) process to the single ionization cross sections for the Sn^{4+} ion. The REDA contribution provides good agreement with measurements at the low collisional energies.

The scaled DW cross sections are compared to the DW ones and measurements for the carbon atom in Fig. 3. Good agreement with measurements is obtained for the scaled data. The unscaled DW cross sections overestimate the measurements over the entire energy range. Furthermore, the peaks of the unscaled cross sections shift to the lower energies compared to the peaks from the measurements. Previously, the scaled plane-wave Born cross sections for the electron-impact excitations were used to mimic the effects related to the polarizability of atomic system [13].

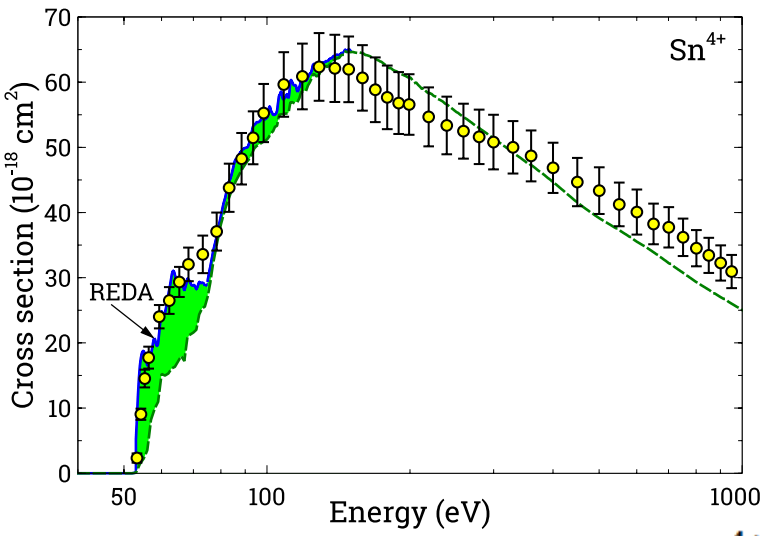


Fig. 2. Comparison of single ionization cross sections for the $\mathbf{Sn^{4+}}$ ion with experimental data [16]. The REDA contribution is shown by shaded area.

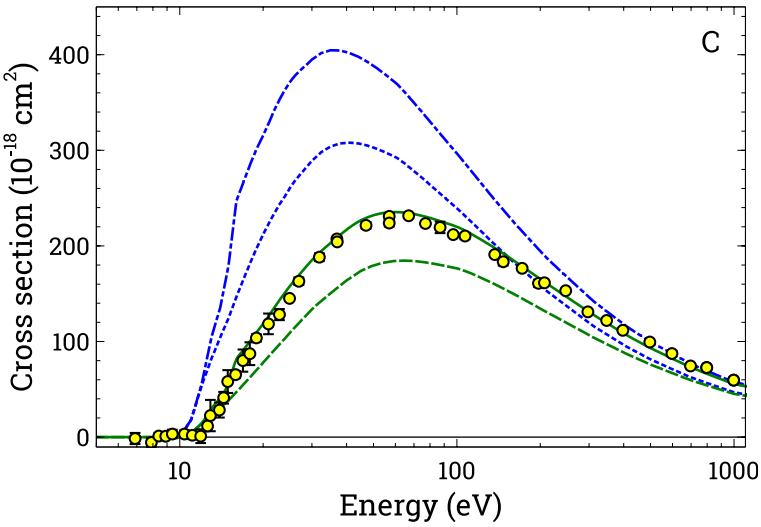


Fig. 3. Single-ionization cross sections for the C atom. Theoretical values correspond to the DW calculations. Solid line (green): total scaled DW cross sections; dashed line (green): scaled DW cross sections for DI; dash-dotted line (blue): total DW cross sections; dotted line (blue): DW cross sections for DI; circles: experiment [17]

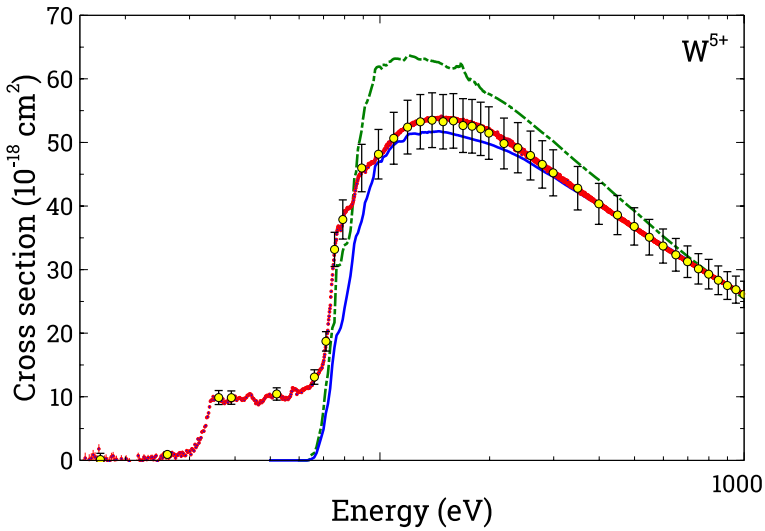


Fig. 4. Electron-impact ionization cross sections for $\mathbf{W}^{5+}$ obtained in the single-configuration approximation (upper green line) and by using a basis of interacting configurations (lower blue line).

The correlation effects may play a crucial role in the ionization process. The cross sections are diminished by $\sim 16\%$ when the correlation effects are taken into account for the W^{5+} ion (Fig. 4) [14]. The largest effect is obtained for the indirect process of the electron-impact ionization in this case. The configuration interaction (CI) method is often used to determine influence of the correlation effects. Therefore, the level-to-level studies for the excitation and collisional ionization processes have to be performed. However, the excitation and ionization have to be analyzed not only for the main configurations but also for the admixed configurations which together form basis of the interacting configurations. The same type of excitations that are included to form the admixed configurations for the CI basis has to be analyzed for both configurations participating in a transition. Otherwise, the calculations can produce the diminished values for the single ionization cross sections. It should be

noted that the correlation effects can be important for the EA channels corresponding to the excitations to the configurations with energy levels that straddle the single ionization threshold. The slight shift of the energy levels or single ionization threshold can lead to the essential changes in the DI and EA cross sections for the considered configurations. What is more, the study of the correlation effects is especially important for the neutral atoms and near neutral ions where the experimental cross sections are often overestimated by the theoretical values. For example, the scaled DW cross sections alongside the CI calculations had to be incorporated to explain the single ionization measurements for the Fe^{3+} ion [18].

[1] T.N. Rescigno, M. Baertschy, W.A. Isaacs, C. W. McCurdy, Science 286, 2474 (1999).
[2] I. Bray, D.V. Fursa, Phys. Rev. A, 54, 2991 (1996).
[3] K. Bartschat, I. Bray, P.G. Burke, M.P. Scott, J. Phys. B 29, 5493 (1996).
[4] J. Colgan, M.S. Pindzola, Phys. Rev. A 74, 012713 (2006).
[5] M.S. Pindzola, D.C. Griffin, Phys. Rev. A 56, 1654 (1997).
[6] S.D. Loch, Sh.A. Abdel-Naby, C.P. Ballance, M.S. Pindzola, Phys. Rev. A 76, 022706 (2007).
[7] D-H. Kwon D. W. Savin. Phys. Rev. A 86, 022701 (2012).
[8] A. Kynienė, G. Merkelis, A. Šukys, Š. Masys, S. Pakalka, R. Kisielius, V. Jonauskas, J. Phys. B 51, 155202 (2018).
[9] Y-K. Kim, M.E. Rudd, Phys. Rev. A 50, 3954 (1994).
[10] Y-K. Kim, P. Stone. Phys. Rev. A 64, 052707 (2001).
[11] Y-K. Kim, J.-P. Desclaux. Phys. Rev. A 66, 012708 (2002).
[12] V. Jonauskas, A&A 620, A188 (2018).
[13] Y-K. Kim, Phys. Rev. A 64, 032713 (2001).
[14] V. Jonauskas, A. Kynienė, S. Kučas, S. Pakalka, Š. Masys, A. Prancikevičius, A. Borovik, M.F. Gharaibeh, S. Schippers, A. Müller, Phys. Rev. A 100, 062701 (2019).
[15] A. Kynienė, S. Kučas, Š. Masys, V. Jonauskas, A&A 624, A14 (2019).
[16] A. Borovik, M.F. Gharaibeh, P.M. Hillenbrand, S. Schippers, A. Müller, J. Phys. B 46, 175201 (2013).
[17] E. Brook, M.F.A. Harrison, A.C.H. Smith, J. Phys. B 11, 3115 (1978).
[18] A. Kynienė, S. Kučas, S. Pakalka, Š. Masys, V. Jonauskas, Phys. Rev. A 100, 052705 (2019).

BIG BANG PHYSICS

B.E.Zhilyaev

Main Astronomical Observatory of the NAS of Ukraine, Kyiv
e-mail: zhilyaev@mao.kiev.ua

Quantum gravity

The general theory of relativity was created on the assumption that the continual description of space-time is preserved on arbitrarily small scales. *Planck* and *Heisenberg* guessed from the start that a continuous description of the real world would likely fail due to quantum effects in gravity. Dealing with three fundamental constants - *Newton's* gravitational constant ***G***, the speed of light ***c*** and *Planck's constant* ***h,*** one can construct a unique combination of the dimension of length, $\boldsymbol{L_p = \sqrt{(Gh/c^3)}}$, its numerical value is ~ 10^{-33} cm. Physics of processes in scales large and smaller $\boldsymbol{L_p}$ should be very different. It is assumed that at distances less than the ***Planck length*** L_p, quantum effects in the geometry of space and time become important. If we ignore them and continue to use the classical continual approximation, infinities appear in calculations, that is, nonsense.

Causal horizon. Humanitarian explanation of physical cosmology

The curvature of space limits our vision of the world; we see the world up to *the event horizon.* Travelling into the past of the Universe, we would notice that the size of the horizon is shrinking, because the curvature of space *1/R is* inversely proportional to the age of the Universe $(R \sim t^{-1/2} \sim (1+z)^{-1})$. The moment would come when the horizon would be reduced to the size of the Galaxy, the Sun, the Earth, the electron….

Hence it is clear that in the history of the Universe there were moments when, *based on causal considerations,* even elementary particles could not exist in it. When the horizon shrinks to the size of an elementary particle, the gravitational force and "field forces", which determine the electromagnetic/weak/strong interaction, and, accordingly, the structure of an elementary particle, must equal in size and *something must have happened* to the particle. What? - *phase transition.* The weakest of interactions - gravitational, as it deepened into the history of the Universe, *"gained strength",* combined with other interactions, until the era of "***Great Unification"*** came. Phase transitions were accompanied by symmetry breaking and the appearance of new structures - ***strings, textures, monopoles, and branes***. These structures are ***topological defects,*** a consequence of symmetry breaking during phase transitions in the matter of the Universe.

Quantum-mechanical description of the Universe at an early stage of its development

From the uncertainty relation $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$, it can be argued that for sufficiently small Δt, the uncertainty of the energy ΔE can be so great that the state of the system cannot be regarded as stationary. For stationarity, it is necessary that the uncertainty

ΔE be small in comparison with the distances between energy levels in the energy spectrum. Even in the case of a macroscopic body (system) at the initial stage of the development of the Universe, one can find such Δt when this condition is not satisfied. In this case, the description of the state of the body (system) with the help of the wave function becomes impracticable, because there is no data necessary for its construction. Quantum-mechanical description using *a density matrix* allows us to calculate the average value of any quantity that characterizes the system. However, the lack of sufficient data to plot the wave function excludes this possibility. Thus, the quantum-mechanical description of the Universe at the earliest stage of its development becomes impossible ***within the framework of a stationary model*** [1]**.**

Phase transitions in the early universe

As we move forward in time from the moment of creation, the universe becomes less hot and less dense, until phase transitions begin to occur in matter, changing its shape and properties. Phase transitions are accompanied by symmetry breaking.

The familiar phenomenon of phase transitions is associated with water. With a decrease in temperature, its properties change dramatically: the gaseous phase - vapour - passes into the liquid phase - water - and then into the solid phase - ice. Note that steam is “more symmetrical” than water, which in turn is more symmetrical than ice.

The analogy with water can be helpful in understanding the concept of symmetry and symmetry breaking in the universe.

Topological defects

Phase transitions have many important consequences, including the formation of topological defects - zero-dimensional ***monopoles,*** one-dimensional ***cosmic strings,*** two-dimensional ***domain walls,*** and ***textures.*** They could also cause a period of ***inflation*** **(*)** (exponential *expansion of the Universe)*. The type of the resulting defect was determined by the properties of the symmetry of matter and the nature (temperature) of the phase transition.

(*) *Modification of the Big Bang model, which includes a period of exponential expansion at an early stage in the development of the Universe, called ”***inflation***”. In a typical inflationary scenario, exponential expansion began at about 10^{-34} seconds after the beginning of time and ended when the universe was a hundred times older (that is, after about 10^{-32} seconds). During this time interval (the 'Inflation Epoch'), all distances in the Universe have increased approximately 10^{50} times. The event horizon has grown from 10^{-24} cm to 300 million light years. Inflation was more about the expansion of space than the movement of particles through space.*

Cosmic strings

- ***Light strings*** (~ 10^{-33} cm long) are associated with some models of elementary particles, in particular, their formation is determined by electroweak interaction. It is assumed that ***cosmic strings*** arose from these elementary

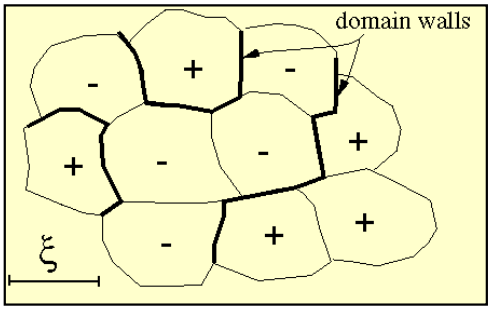
strings during the *expansion of the Universe (inflationary)* at the earliest stage of its development, when the event horizon was comparable to the size of elementary particles.

- ***Cosmic strings*** are one-dimensional objects that form when axial or cylindrical symmetry is broken. They are very subtle and can extend across the entire visible universe. A typical string is a trillion (10^{12}) times thinner than a hydrogen atom. A segment of such a string *10* km long has the mass of the Earth. The number of such strings in the Metagalaxy is about *40* pieces.
- ***Cosmic strings*** are hypothetical objects; no one has ever observed them. They can make up a significant portion of dark matter in the universe.

How are topological defects formed?

- In a cosmological context, the process of defect formation is known as the ***Kibble mechanism***.
- The fact is that any interactions in the early universe, due to causal relationships, could only propagate at the speed of light ***c.*** This means that at time ***t,*** the area of the universe, remote distance more than $\xi = ct$, can not know anything with respect to each other. When symmetry breaks down during phase transitions, different regions of the universe will come to different states with the minimum energy from a possible set of states (this set in mathematics is known as a ***vacuum manifold)***. Topological defects are actually "boundaries" between these areas with different variants of energy minima, and their formation is an inevitable consequence of the fact that different areas cannot agree on their choices.

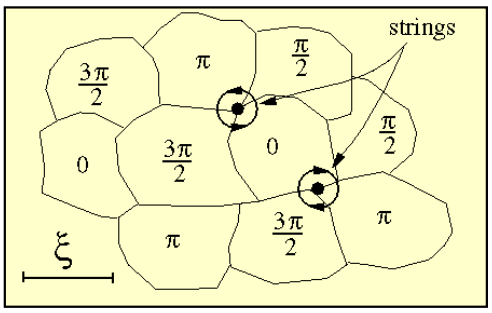
For example, in a theory with two minima, adjacent regions (plus + and minus -) separated by more than ***ct*** will tend to *randomly* fall into one of two states (as shown below). The boundaries between these different minima are known as ***domain walls.*** They have a well-known analogue in low-temperature physics - domains in ferromagnets.



The Kibble mechanism for the formation of domain walls

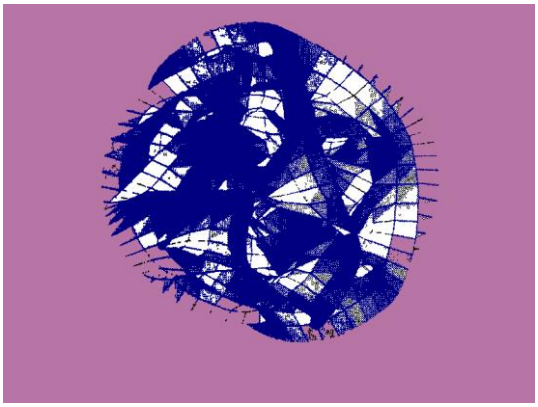
Domain wall - *domain* boundary; area border; the border separating the regions of two possible minima of potential energy (vacuum).

Cosmic strings arise in more complex theories in which the *«holes»* have the lowest energy state. ***The strings*** correspond to the non-trivial case of *«firmware wires»* in these *«holes»* (as shown below).



Some questions of multidimensional physics

- The existence of extra spatial dimensions postulated ***Kaluza and Klein*** in 1919. The ***3 D*** observers have no senses to perceive these dimensions.
- Quantum string mechanics operates with *10* spatial and *1* temporal dimensions. Moreover, *3* spatial and *1* temporal dimensions *turn out to be* infinite, and the rest are collapsed.
- Why *10* measurements? For *11* or more measurements, massless particles with spin *2* appear in theory, which is unacceptable from a theoretical and experimental point of view.
- The masses and charges of *elementary particles* are determined by the vibration modes of the strings. And the vibration modes depend on the size and shape of additional compact dimensions.
- In the real world, the extra dimensions are not folded into cylindrical surfaces, as ***Kaluza and Klein*** suggested, but into spaces of a more complex nature. In *1984*, it was found that the string theory equations were satisfied by a class of *6*- dimensional complex geometric Calabi-***Yau manifolds.***



This is a two-dimensional projection of one of the many *6*-dimensional ***Calabi-Yau spaces.*** This is the structure of our space on a scale of ~ 10^{-33} cm.

Our Universe contains additional dimensions

• According to string theory, at every point in our space, there are six extra dimensions, folded into a bizarre shape of ***Calabi-Yau spaces.*** These dimensions are an integral part of the structure of our space, they are present everywhere. They are so small and so tightly twisted that they cannot be detected with modern experimental equipment.

Brane cosmology

The development of new theories with more than three spatial dimensions gave rise to the concept of ***«brane worlds».*** It is assumed that ordinary matter is enclosed in a ***three-dimensional submanifold*** - ***brane*** - immersed in a ***fundamental multidimensional space.*** We are confronted with perhaps the most striking result of the revolution in physics, namely the possibility that we live on a hypersurface within a higher dimensional space-time. In the ***brane world,*** *additional dimensions* can be extended, and even infinite, they can demonstrate effects directly observed in present or future experiments. From here it is a stone's throw to the idea of a plurality of ***brane worlds*** - other (parallel) universes [2].

Some questions of a multidimensional physicist

We get the following picture: at large scales (*low energies)*, the Universe looks like a ***4D (3 + 1)*** object. At energies between $10^{12 \div 16}$ *GeV* - as ***5D,*** and at higher energies (smaller *scales)* looks as ***11D*** *(10 + 1).* Because of the uncertainty relation $\Delta t \sim h/\Delta E$ that the energy $10^{12\text{-}14}$ *GeV* and 10^{19} *GeV* correspond to the age of the universe ~ $10^{-(36 \dots 38)}$ and ~ 10^{-43} seconds. Hence it follows that near the ***Planck age*** (~ 10^{-43} sec) the topology of the Universe changed radically. The number of spatial dimensions has evolved from ten to the present three. The dimensions of the rolled-up measurements are ~ 10^{-33} cm.

Conclusion

- Quantum effects played a decisive role in the *Planck era* (~ 10^{-43} s from the moment of the birth of the Universe). They played an important role until the *10*- day age of the Universe, when nucleosynthesis and the formation of atoms were completed.
- Quantum effects continue to play a decisive role at the *Planck* spatial scales (~10^{-33} cm). Here space-time acquires an *11*- dimensional structure. This is the arena for the existence of elementary particles and exotic matter, hiding under the pseudonyms of "*dark matter*" and "*dark energy*". On a larger scale, space-time takes on a familiar structure with three spatial and one temporal dimension.
- Quantum effects also play a mysterious role at *Planck energies of* ~10^{19} *GeV.* Such energies, on the one hand, are characteristic of an oscillating string in

string theory, and on the other hand, they are observed in the most powerful transients in the Universe - gamma flares.

- Surprisingly, the structure of matter at the smallest scales is associated with the structure of the Universe at global distances.
- The main object in the modern theory of fundamental particles is not a point (zero-dimensional) particle, but an extremely short one-dimensional structure - a *"string"*. It is assumed that the strings are approximately 10^{-33} cm long. The different modes of vibration of the strings correspond to different types of particles. String theory (M-theory) requires *11*-dimensional space-time, all of these dimensions except four (length, width, height and time) are *compact*, that is, hidden from us [3].
- In the *Planck era*, all *10* spatial dimensions were approximately the same *Planck size.* Then *3* dimensions began to expand to infinity, the rest (cyclic dimensions) remained collapsed.
- Responsible for the physical properties of the surrounding world is a certain variety of *Calabi-Yau.* The type of *Calabi-Yau* space affects particle masses, properties of interactions and forces in the material world. Thus, the properties of elementary particles and the initial cosmological conditions in the Universe turned out to be related through the geometry of the *Calabi-Yau manifold.*
- A more general type of objects in *M*- theory is *membranes (branes).* Branes can be of different dimensions and shapes. For example, *zerobrane* is a particle, *onebrane* is a string, *twobrane* can be a membrane and *threebrane* can be the ***universe.*** Nobody knows yet what *4* -branes can be.

[1] L. Landau, E. Lifshitz, Statistical Physics 1, 29 (1976).
[2] V.A. Rubakov, Large and infinite extra dimensions, (arXiv: hep-ph / 0104152, p. 8, 21, 23, 43-45).
[3] B. Greene, The Elegant Universe. Superstrings, Hidden Dimensions, and the Quest for the Ultimate Theory, Vintage Books, A Division of Random House, Inc. New York.

ELECTRON IMPACT EXCITATION OF SINGLY CHARGED IN ION

S.Bharti

Indian Institute of Technology Roorkee, Roorkee, India
e-mail: swatibhartiugc@gmail.com

Theoretical and experimental investigations made on electron impact excitation of singly and multiply charged metal ions are important for better understanding of atomic structure and have many practical applications in several research areas including astrophysics, fusion research and laser applications [1, 2]. The observations from Goddard High Resolution Spectrograph (GHRS) aboard the Hubble Space Telescope (HST) indicate the existence of elements heavier than zinc in the interstellar medium [1] including In II. In II has been the subject of various experimental and theoretical studies due to its significant presence in interstellar medium and application in solid state lasers [3]. It has been approved as a good candidate for optical frequency precision [4]. In view of the earlier reports on the very sophisticated experimental arrangements the theoretical studies have been more feasible and reliable to explore dynamical aspects of collisions between electron and In II ion as well as spectroscopic aspects. In present study we investigate mainly transitions for astrophysical importance in inelastic collision of electron with singly charged indium ion within the medium energy range of incident electron.

A systematic study of the electron impact excitation process requires the knowledge of accurate dipole transition probabilities or oscillator strength for spontaneous emission between the various configurations of the ion. Therefore, a deep analysis became more significant to ascertain the accuracy in the results. In this study we recalculated the structural properties of various spectroscopic lines as they are important for astrophysical purpose. To perceive the accuracy in results a well optimized set of configuration state functions (CSFs) have been considered for the atomic structure studies of In II ion. We have considered $5s^2$, $5s6s$, $5s5d$, $5s7s$, $5s6d$, $5s8s$, $5p^2$ as even parity configurations and $5s5p$, $5s6p$, $4f5s$, $5s7p$, $5s5f$, $5p5d$ as odd parity configurations in non-relativistic scheme. This results into 20 and 36 CSFs for even and odd parity states, respectively. These wavefunctions are optimized on the basis of the comparison between our calculated oscillator strengths with the corresponding values from the NIST database [5] as well as other theoretical results.

In order to provide brief outlook of the methodology used in this investigation, we have chosen the *Collision frame of reference* with quantization axis (*z*-axis) to be along the direction of the incident electron beam while the scattering plane is chosen

to be the *xz*-plane. For describing the scattering process, one needs to evaluate the scattering amplitude or transition matrix (*T*-matrix). RDW approximation is a first order perturbation theory, the scattering amplitudes for two electron transitions vanish and hence, the CSFs involving two electron transitions will not contribute. Furthermore, we have ensured in our calculations to include all those CSFs having value of mixing coefficient of the significant order i.e. the leading configurations, with a minimum contribution of 0.01% in the CSFs of In II ion. Thus, the present optimized wavefunction can be counted on to provide accurate cross sections.

After obtaining the bound state wavefunctions, we can generate the continuum state wavefunctions for the projectile electron within the RDW approximation. Finally, we compute the *T*-matrix to determine the excitation cross section σ_{ij} as described below.

In the RDW approximation, the *T*-matrix for electron impact excitation of a transition from initial state $|\alpha_i, J_i, M_i\rangle$ to the final state $|\alpha_f, J_f, M_f\rangle$ of an atom or ion with *N* electrons and nuclear charge *Z* can be expressed as,

$$T_{i\to f}^{DW}\left(J_i, M_i, \mu_i; J_f, M_f, \mu_f, \theta\right) = \langle \chi_f^-(\mathbf{1}, \mathbf{2}, \dots, \boldsymbol{N}+\mathbf{1}) | V_{in} - U_f(N+1) | \mathcal{A}\chi_i^+(\mathbf{1}, \mathbf{2}, \dots, \boldsymbol{N}+\mathbf{1})\rangle. \quad (1)$$

Here, $J_{i,f}$ and $M_{i,f}$ are the total angular momenta and magnetic quantum numbers of the target ion before and after excitation and $\alpha_{i,f}$ denote all the additional quantum numbers required for unique identification of the states. The numbers $1,2,\dots,(N+1)$ refer the combined spin and position coordinates of the electrons with respect to the nucleus of the atom. $\mathcal{A}$ is the antisymmetrization operator which accounts for the exchange of projectile electrons with the atomic electrons. $U_f(N+1)$ refers to the distortion potential which is chosen to be the spherically symmetric static potential of the target in its final states. $\chi_{i/f}$ denote the product of atomic wavefunction $\Phi_{i/f}$ and projectile electron distorted wavefunction $F_{i/f}^{DW\pm}$ in initial/final states, i.e.,

$$\chi_{i/f}^{\pm}(\mathbf{1}, \mathbf{2}, \dots, \boldsymbol{N}+\mathbf{1}) = \Phi_{i/f}(\mathbf{1}, \mathbf{2}, \dots \boldsymbol{N}) F_{i/f,\mu_{i/f}}^{DW\pm}\left(\boldsymbol{k}_{i/f}, \boldsymbol{N}+\mathbf{1}\right). \quad (2)$$

Here +/- sign refer to the incoming/outgoing waves with wavevectors, $\boldsymbol{k}_{i/f}$, having magnitudes

$$k_{i,f} = \frac{\sqrt{E_{i,f}\left(E_{i,f} + 2c^2\right)}}{c} \quad (3)$$

where $E_{i,f}$ are the relativistic energies (including the rest mass of the electron) and c is the speed of light.

In equation (1), term V_{in} is the interaction of projectile electron with the target atom or ion, given by

$$V_{in}(r_i, r_{N+1}) = -\frac{Z}{r_{N+1}} + \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_{N+1}|}. \quad (4)$$

The position coordinates of the atomic and projectile electrons with respect to the nucleus are given by respectively, $\boldsymbol{r}_i (i = 1, \ldots, N)$ and $\boldsymbol{r}_{N+1}$.
The *T*-matrix can be rewritten in the following form to obtain the scattering amplitude $f_{i\to f}^{DW}$,

$$f_{i\to f}^{DW}\left(J_i, M_i, \mu_i; J_f, M_f, \mu_f, \theta\right) = (2\pi)^2 \sqrt{\frac{k_f}{k_i}} T_{i\to f}^{DW}\left(J_i, M_i, \mu_i; J_f, M_f, \mu_f, \theta\right) \quad (5)$$

The scattering amplitude can be related to the differential cross-section using the expression,

$$\frac{d\sigma_{ij}}{d\Omega} = \frac{1}{2(2J_i + 1)} \sum_{\substack{M_i\,\mu_i \\ M_f\,\mu_f}} \left| f_{i\to f}^{DW}\left(J_i, M_i, \mu_i; J_f, M_f, \mu_f, \theta\right)\right|^2 \quad (6)$$

Here summation is carried out over magnetic quantum states in the final channel and average is taken for magnetic quantum states in the initial channel.
Further, the angular integration of the differential cross section (DCS) gives the angle-integrated cross-section,

$$\sigma_{ij} = \int \frac{d\sigma_{ij}}{d\Omega} d\Omega. \quad (7)$$

In this study the excitation cross section for In II ion from ground state configuration $5s^2\ {}^1S_0$ to excited state configurations 5*s*5*p* and 5s6*p* has been studied along with the excitation calculations from excited states. Excitations cross section data from excited states of the atoms and ions viz. metastable and higher lying states play an important role in plasma diagnostics. The excitation cross sections from higher lying fine structure states are generally larger in comparison to the ground state since lesser excitation energy is required to overcome the excitation threshold from an excited state. In this order the cross section from excited state configuration 5*s*5*p* to 5*s*6*s* and 5*s*5*d*, from 5*s*6*s* to 5*s*6*p*, from 5*s*5*d* to 5*s*6*p* excited state configuration have been calculated within 15 to 200eV energy range of the incident electron.

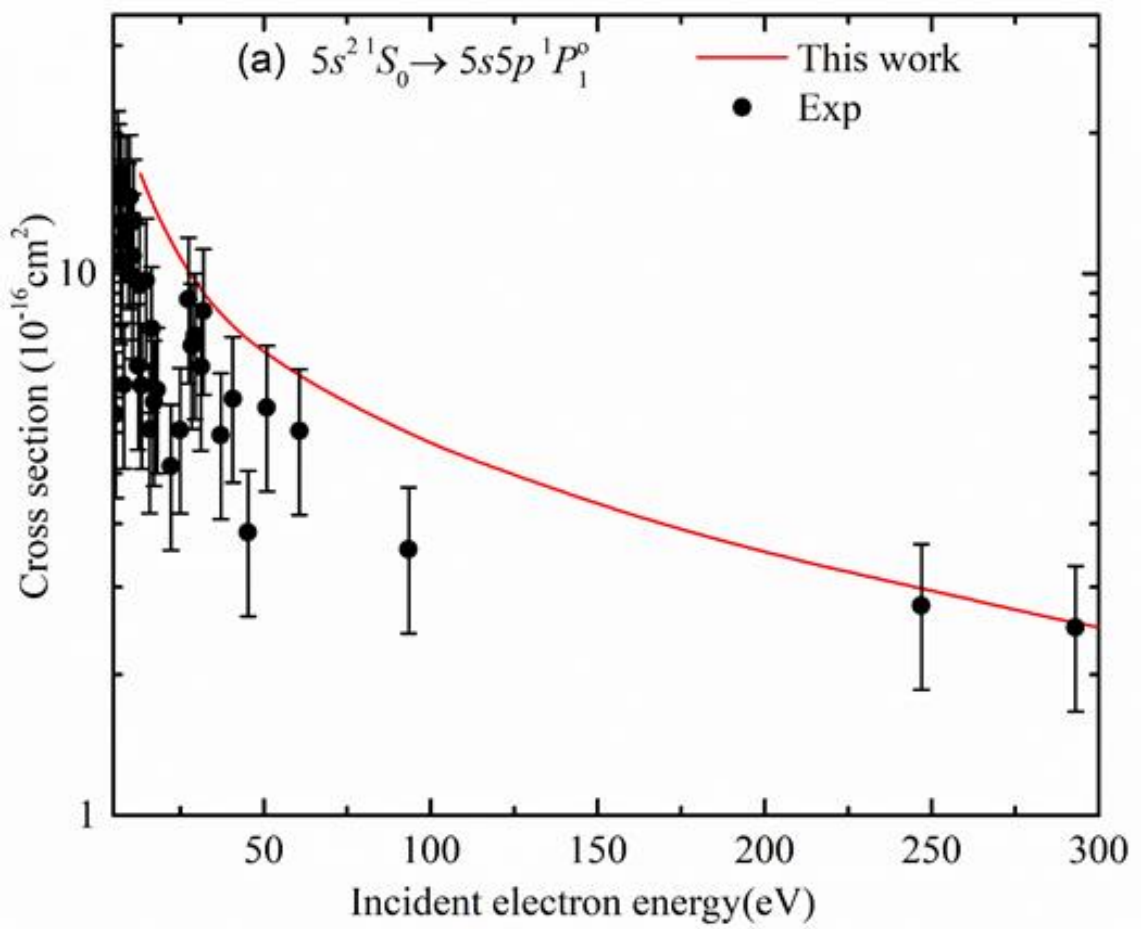


Figure 1: The Integrated cross sections for electron impact excitation of the ground $5s^2\,{}^1S_0$ state to the excited state $5s5p\,{}^1P_1^{\circ}$ compared with the measurements of Gomonai *et al* [6].

For example, we have shown in Figure 1 the comparison between our results for dipole allowed transition $5s^2\,{}^1S_0 \rightarrow 5s5p\,{}^1P_1^{\circ}$ with the available experimental results for emission cross sections reported by Gomonai *et al* [6] in the electron energy range from 7-300 eV. Since these measurements include cascade effects from higher lying state, our cross sections show deviations from these results. However, at high energies we observe that our cross sections are in reasonable agreement with the experimental values and lie majorly within the uncertainties of the measurement. Also we have included here cross sections from excited state $5s6d\,{}^3D_{1,2,3}$ to the higher lying fine structure state $4f5s\,{}^3F_{2,3}^{\circ}$ in Figure 2 for three transitions. the calculated value of the excitation cross section is relatively higher with a value of $1.7244 \times 10^{-14}\,\mathrm{cm}^2$ for the transition $5s6d\,{}^3D_1 \rightarrow 4f5s\,{}^3F_2^{\circ}$ in comparison to the transitions which occurs from the ground state. As we can observe that all three transitions have same-spin transition i.e. triplet to triplet transition so the value of cross section is rather higher.

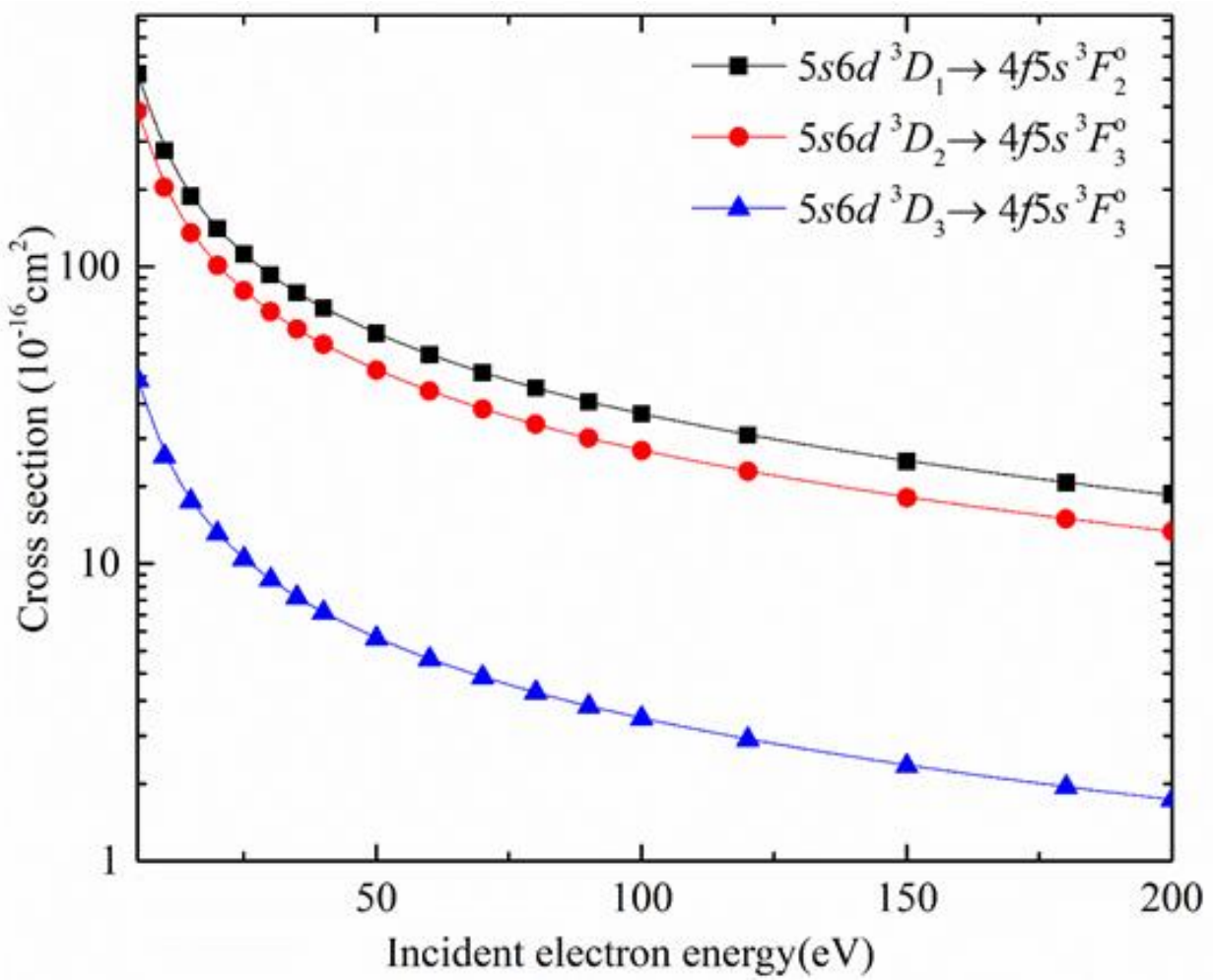


Figure 2: The electron impact excitation cross sections for the higher lying fine structure transitions $5s6d\ ^3D_{1,2,3} \rightarrow 4f5s\ ^3F^{\circ}_{2,3}$ as a function of incident electron energy.

For the third transition $5s6d\ ^3D_3 \rightarrow 4f5s\ ^3F^{\circ}_3$ in Figure 2 the excitation cross sections are smaller than other two as this transition has the higher value of the excitation threshold among the three transitions.

In order to make our results available for desired purpose of plasma applications, we have fitted our calculated cross sections for all the fine-structure transitions using the appropriate analytical expressions. For low to intermediate energy range, the following analytical formula has been employed to fit the cross sections,

$$\sigma(J_i \rightarrow J_f) = \frac{\sum_{i=0}^{n} b_i E^i}{c_0 + c_1 E + c_2 E^2} \ . \qquad (8)$$

Here, incident electron energy E and cross section (σ) are in atomic units. In the above equation b_i, c_0, c_1 and c_2 are the fitting coefficients which can be discuss in the talk. The cross sections for dipole allowed transitions fall-off as $\ln E / E$ in high energy range of the projectile electron. Therefore, the Bethe-Born form, is used to fit the cross sections at high energies i.e. 5 to 6 times of the excitation threshold energy,

$$\sigma(J_i \rightarrow J_f) = \frac{1}{E}(d_0 + d_1\, ln(E)), \tag{9}$$

where scattered electron energy E and cross section (σ) are in atomic units. d_0 and d_1 represent the fitting coefficients. Details about this study will be discuss in the talk.

[1] J. A. Cardelli, Science, 265, 209 (1994).
[2] F. Paschen and J. S. Campbell, Ann. Phys. F 31, 29 (1938).
[3] E. V. Ovcharenko, A. I. Imre, A. N. Gomonai and Yu I. Hutych, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43, 175206 (2010).
[4] P.L. Larkins and P. Hannaford, Z. Phys. D 27, 313 (1993).
[5] NIST Atomic Spectra Database, www.nist.gov/pml/data/asd.cfm
[6] A. Gomonai, E. Ovcharenko, A. Imre, Yu. Hutych, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 233, 250 (2005).

NONLINEAR CRYSTAL $Sn_2P_2S_6$: METHODS OF MODIFICATIONS AND POTENTIAL APPLICATIONS

A. Grabar, M. Tsyhyka, A. Molnar, A. Kohutych,
K. Glukhov, S. Hasynets, Yu. Vysochanskii

Institute for Solid State Physics and Chemistry of Uzhhorod National University, Uzhhorod
e-mail: alexander.grabar@uzhnu.edu.ua

The chalcogenide crystals of $Sn_2P_2S_6$ family are studied for a long time as a ferroelectric material with large variety of the phase transitions and multi-critical points on the phase diagrams [1]. From the other side, they also possess the efficient photorefractive, electro-optic pyro- and piezoelectric parameters, which can find numerous applications. In this communication we present a review of the activity in this field.

The $Sn_2P_2S_6$ crystals is an example of the ferroelectric-semiconductors with relative narrow bandgap (2.3 eV) that makes this material photo-sensitive and provide some specific properties of this material. Among the main attractive points of this crystal is a photorefractive (PR) effect that represents a change of the optical parameters by a low-power optical irradiation. This effect is a combination of the photoconductivity and the linear electro-optic effect, and is useful for many optical applications using the principles of dynamic holography [2].

As compared with other PR materials, $Sn_2P_2S_6$ has such advantages as sensitivity in the red and near-infrared spectral range [3-6], relatively short response times (in scale of milliseconds) and the diffraction efficiencies that allow to realize optical schemes for laser beam manipulations, wave conjugation, spectral filtering and many others [7,8]. Another peculiarity of this material is the diffusive mechanism of the PR effect, i.e. that the formation of the space charge occurs due to diffusion of the photoinduced charge carriers [3, 6] and leads to formation of the dynamic phase gratings via electro-optic effect [9]. This mechanism ensures non-locality of the phase gratings, and consequently the effect of the light beam coupling in the standard two-beam holographic schemes, that is in a basis of the many applications [2]. The coupling is characterized by the two-wave mixing (TWM) gain coefficient Γ that determines the max energy transfer between the interacting laser beams.

Crystal growth and modification technology. The $Sn_2P_2S_6$ crystals of good optical quality are growing by the conventional vapor-transport techniques, that allow to obtain the big enough samples (~ 1 cm^3). The first undoped $Sn_2P_2S_6$ samples demonstrated pretty good PR parameters [3, 6]. But in the further works it was shown that the optical, dielectric and PR parameters of these crystals can be efficiently modified by doping. The growth of these crystals with addition of Sb and Te [6,8] allowed to enhance the PR parameters. One of the best examples of the crystal modification was the so-called “brown” $Sn_2P_2S_6$ sample [10], most probably grown with a high deviation from the stoichiometry. Up to now, this sample represents a “record” TWM gain value (~38 cm^{-1} at 633 nm) and is a demonstration of the great

potential capability of the modified $Sn_2P_2S_6$ as the PR material. Unfortunately, this technique appears to be hardly reproducible, so our technological works were directed to search of the new efficient dopants, as well as to elaboration other ways of the sample modification after growth.

The doped and studied $Sn_2P_2S_6$ crystals were mainly grown also by vapor-transport technique using stoichiometric composition of the components with an additional amount of the dopant in the growth tube, typically in the range from 0.5 up to 5.0 mol.%. It was found that Te, Sb, Bi, Se and Ge enhance the PR sensitivity, as compared with nominally pure samples, whereas In suppress this effect. Our measurements of the optical transmission and photoconductivity show that the both spectra of the doped crystals exhibit additional bands near the fundamental absorption edge, increasing with the dopant concentration. For various doping elements the shape of the absorption bands and its variations with the doping are rather different, that determines the possibilities of variation of the PR parameters (i.e. max diffraction efficiency of the PR gratings, their time constants and the spectral range of the sensitivity), and to optimize these parameters for different applications. Note that recently was founded that the $Sn_2P_2S_6$ crystals grown using Bridgman technique, demonstrates rather good PR parameters in the near infrared (1064 nm) despite of the lower optical quality (increased light scattering) [11], that is perspective for further improvement the growth technologies.

In addition, the crystal modification was realized using thermo-induced indiffusion of the dopant atoms (Cu and Ag) [12]. In our experiments, the $Sn_2P_2S_6$ specimens with gradients of the indiffused Cu atoms along different crystallographic directions were obtained by such a way. We measured the variation of the dielectric constant, optical transmission and TWM gain at 633 nm along the direction of diffusion. We also studied these Sb- and Te-doped crystals, modified by Cu indiffusion after growth. It was found that an impact of both doping at growth and post-growth indiffusion on the PR parameters leads to an increasing of the compensative component of the photoinduced space-charge grating, i. e. screening effects due to increased electric conductivity. Besides, the $Sn_2P_2S_6$ co-doped with Cu(0.5-1%) and Sb(0.5-1%) crystals were grown, and it was found that the optical absorption spectra of these materials are similar to the case of the Sb-doped sample, but the PR parameters show a substantial difference: the formation of the space-charge grating is single-exponential, and practically without the compensation processes occurring due to screening of the primary space-charge grating and so reducing the TWM gain value. This is a substantial advantage for use this PR material in holographic schemes, that is illustrated by high stability of the dynamical interferometers and other photorefractive schemes exploiting the double-doped $Sn_2P_2S_6$:(Sb, Cu) crystals.

Computer modeling. The obtained experimental results well correlate with *ab initio* calculations of the electron spectra in the $Sn_2P_2S_6$ lattice with various defects. The model calculations were used for estimation the defect levels in the gap created by the various dopants (Sb, Te and others). The calculated potential barriers between probable positions of the indiffused atoms in the $Sn_2P_2S_6$ lattice correlate with the experimental results on the thermo-induced diffusion in different crystallographic

directions. Besides, the model calculation of the electron spectra in the $Sn_2P_2S_6$ lattice with two defects (Cu and Sb) in the same unit cell give an explanation of the absence of the compensations processes in the double-doped crystal. As it was shown in [13], the Sb^{3+} impurity replaces the Sn^{2+} cations, charge-compensated by appearance the Sn vacancies. This leads to formation the defects of two types, including tin vacancies, that can be a reason of the electron-hole compensation at the formation of the photorefractive holograms. As it follows from the calculations of the electron spectra, the Cu^{1+} impurity, located near Sb^{3+}, form the additional electron states that correspond to the same energy, and so are forming single electron level in the gap. This well correlates with the exponential dynamics of the space-charge grating formation, that is predicted by a single-level model of the PR effect.

Applications. Among the most perspective applications of the PR crystals is dynamic interferometry based on a TWM of laser beams. These interferometers are used for remote detection of small dynamic phase variation produced by vibrations of various objects reflecting the probe laser beam. The main advantage of such schemes is their adaptation to slow (relative to the time constant of the hologram formation) variation of the phase, i.e. occurring in time larger than the reversal time response of PR grating. Dynamic interferometers find numerous applications in optical schemes of laser diagnostics, measurements of small displacements, dynamic novelty filters etc. The basic element of the interferometer is the PR crystal with fast response and high two-wave mixing gain at the used laser wavelength, and $Sn_2P_2S_6$ single crystals doped with Sb (0.5-1.5 mol.%) is a good example of such material: it demonstrates rather high values of the two-wave mixing gain (up to 18 cm^{-1} at 633 nm light wavelength) along with a relatively short response time (10…100 ms) [5,6]. In our works we examined several variants of the interferometric schemes constructed on the base of $Sn_2P_2S_6$:Sb crystal. First, the conventional two-beam scheme [14] that allows to detect the parameters of vibrations of one mirror, driven by piezoelectric actuator and reflecting the probe laser beam. The scheme acts as a frequency filter in which the cut-off frequency that depends on the laser beam intensity and photorefractive grating spacing. In our experimental conditions, this value was in a range of ~10 Hz that corresponds to the inverse time constant of the PR grating formation. For testing the wider frequency range of the vibrations, we used also a heterodyne principle when the reference beam is also phase-modulated. The shape of the signal depends on the amplitude of the vibrating object, and the higher harmonics appear in the signal at higher amplitudes of the “signal” (or “pump”) phase modulation. This gives a possibility to measure the amplitude of the vibration of the objects by an analysis of the waveform of the signal at various amplitudes of the “pump”. The relative phases of the modulations of the “signal” and “pump” also can be estimated basing on the signal level at equalized modulation frequencies. Partially, the sweeping of the “pump” modulation frequency allows detecting the vibration frequency of the object with a high precision. Note that the phase-modulation technique can be also used for measurements the material parameters, partially for study the peculiarities of the two-wave mixing gain dispersion in various doped compounds of the $Sn_2P_2S_6$ crystals.

The high TWM gain value in the $Sn_2P_2S_6$:Sb crystal allows to construct a lensless scheme applicable for optical detection of micro-vibrations, partially to put in evidence 2d-patterns of vibrating surfaces illuminated by a laser beam [15]. This

scheme is based on the image formation in a space-limited amplifying dynamic hologram, formed by a narrow (focused) reference beam, and which acts similarly to an optical pinhole in the known "camera obscura" device. We demonstrate that such scheme can be used for visualization of the dynamical wavefront distortion of the coherent light scattered by a vibrating rough surface [15]. The lensless scheme also can be used for the optical detection of microvibrations whose frequency is much higher than the reversal response time of the PR material by using a heterodyne principle, like in the above TWM scheme. The advantages of this in comparison with the known dynamical interferometers exploiting the TWM effects are the following: this is a focus-free optical scheme which does not require the adjustment of the interacting beams and focusing elements, and which is able to get the dynamic picture from a rough light-scattering object. Basing on the strong and fast beam fanning in $Sn_2P_2S_6$:Sb [6], i.e. PR dynamic amplified light scattering inside the sample, one can also construct a simplified one-beam interferometer [16]. The main advantage of this scheme is that it does not require an equalizing of the optical arms, and phase modulation of the input beam can be detected by modulation of the scattering intensity, or by variation of the incident laser beam. By introducing the additional phase modulation, here one can also realize the advantages of the heterodyne principle, and to measure frequency, amplitude and phase of the vibrating object by compensation of the phase modulation by the way similar to described above, i.e. by tuning the frequency, amplitude and phase of the vibrations of the second mirror.

The $Sn_2P_2S_6$ doped crystals are shown to be applicable for the realization of the "slow light" scheme [17-19], i.e. the controllable laser pulse delay in conditions of the TWM process. The pulse delay was achieved up to the values of the efficient group velocity in several cm/s, that is perspective for construction the light delay lines. It was also demonstrated that the laser pulse control can be achieved by using the beam fanning [17] that makes the devices very compact and simple.

One of the most perspective application of the $Sn_2P_2S_6$:Te crystals was their use in the scheme of the acousto-optical diagnostics of the biological objects, like human body. The main idea of such a device is the local testing of the object in the crossing point of the acoustic focused wave and the laser beam with the wavelength from the "therapeutic" spectral window (~790 nm), that is strongly scattered in such a media. The extremely weak and frequency-shifted diffracted light is amplified in the PR element ($Sn_2P_2S_6$:Te 1% crystal) due to TWM with the "pump" laser beam from the second optical arm, with introduced the same frequency shift. The obtained results show a capability to detect small inclusions ~0.5 cm. This technique is considered as the complementary to the usual ultrasonic method usable for early cancer tumor detection [20-23].

Conclusions. The $Sn_2P_2S_6$ crystals with various dopants are very promising materials for dynamic holography, photonics and nonlinear optics, with great potential capability for further improvement and novel applications.

[1] Yu. M. Vysochanskii, T. Janssen, R. Currat, R. Folk, J. Banys, J. Grigas, V. Samulionis. Phase transitions in ferroelectric phosphorous chalcogenide crystals (Vilnius University Publishing House, 2006).

[2] L. Solymar, D. J. Webb, A. Grunnet-Jepsen. The physics and applications of photorefractive materials (Clarendon Press, 1996).
[3] S. G. Odoulov, A. N. Shumelyuk, U. Hellwig, R. A. Rupp, A. A. Grabar, I. M. Stoyka, J. Opt. Soc. Am. B 13, 2352 (1996).
[4] M. Jazbinšek, D. Haertle, G. Montemezzani, P. Günter, A. A. Grabar, I. M. Stoika, and Y. M. Vysochanskii, J. Opt. Soc. Am. B 22, 2459 (2005).
[5] I. Kedyk, P. Mathey, G. Gadrét, A. Grabar, K. Fedyo, I. Stoika, I. Prits, Yu. Vysochanskii, Appl. Phys. B 92, 549 (2008).
[6] A. A. Grabar, M. Jazbinšek, A. N. Shumelyuk, Yu. M. Vysochanskii, G. Montemezzani and P. Günter. Photorefractive effects in $Sn_2P_2S_6$. In: "Photorefractive Materials and Their Applications v. II (Springer, New York 327, 2007).
[7] M. Jazbinšek, G. Montemezzani, P. Günter, A. A. Grabar, I. M. Stoika, Yu. M. Vysochanskii, J. Opt. Soc. Am. B 20, 1241 (2003).
[8] T. Bach, M. Jazbinšek, G. Montemezzani, P. Günter, A. Grabar, Yu. Vysochanskii, J. Opt. Soc. Am. B 24, 1535 (2007).
[9] D. Haertle, G. Caimi, A. Haldi, G. Montemezzani, P. Günter, A. A. Grabar, I. M. Stoika, and Y. M. Vysochanskii, Opt. Commun. 215, 333 (2003).
[10] A. Grabar, I. V. Kedyk, M. I. Gurzan, I. M. Stoika, A. A. Molnar, Yu. M. Vysochanskii, Opt. Commun. 188, 187 (2001).
[11] O. M. Shumelyuk, A. Y. Volkov, Y. M. Skrypka, L. E. Halliburton, N. C. Giles, C. A. Lenyk, S. A. Basun, A. A. Grabar, Y. M. Vysochansky, S. G. Odoulov, D. R. Evans, J. Appl. Phys. 127, 103103 (2020).
[12] V. Shvalya, J. Zavašnik, V. Nasretdinova, H. Uršič, J. Kovač, A. Grabar, A. Kohutych, A. Molnar, D. R. Evans, D. D. Mihailović, U. Cvelbar, J. Mater. Chem. C 8, 9975 (2020).
[13] B.E. Kananen, E.M. Golden, S.A. Basun, D.R. Evans, A.A. Grabar, I. M. Stoika, W. McClory, N. C. Giles, L. E. Halliburton, Opt. Mater. Express 6(12), 3992 (2016).
[14] A. Grabar, P. Mathey, M. Tsyhyka, G. Gadret, I. Stoika, J. Phys.:Conf. Ser., 867, 012027 (2017).
[15] A. Grabar, P. Mathey, R. Iegorov, G. Gadret, Opt. Commun. 284, 5361 (2011).
[16] О. О. Грабар, М. В. Цигика, Науковий вісник Ужгородського університету: серія Фізика 40, 18 (2016).
[17] A. Shumelyuk, S. Odoulov, J. Opt. 12, 104015 (2010).
[18] A. Grabar, P. Mathey, G. Gadrét, Journ. Opt. Soc. Amer. B. 31, 980-986 (2014).
[19] N. Bouldja, A. Grabar, M. Sciamanna, D. Wolfersberger, Phys. Rev.Research. 2 (3), 032022 (2020).
[20] S. Farahi, E. Benoit, A. A. Grabar, J.-P. Huignard, F. Ramaz, Optics Letters 37, 2754 (2012).
[21] J.-B. Laudereau, A. A. Grabar, M. Tanter, J.-L. Gennisson, and F. Ramaz, Optics Express 24, 3774 (2016).
[22] M. Bocoum, J.-L. Gennisson, C. Venet, M. Chi, P. M. Petersen, A. A. Grabar, F. Ramaz, Optics Letters 43, 399 (2018).
[23] M. Bocoum, J.-L. Gennisson, A. A. Grabar, F. Ramaz, J.-M. Tualle, Opt. Lett. 45, 4855 (2020).

NANODIAMONDS PRODUCTION ON THE MICROTRON MT25

D. Chvatil, V. Olsansky, T. Kuda

Nuclear Physics Institute of the Czech Academy of Sciences, Rez, Czech Republic
e-mail: chvatil@ujf.cas.cz

Nanotechnologies and nanomaterials are an increasing important object of scientific interest. Nanomaterials are coming into use in healthcare, electronics, cosmetics and other areas. Their physical and chemical properties often differ from those of bulk materials. Thus nanodiamonds are diamonds particles with a size below 1 micrometer. They can be produced by impact events such as an explosion or meteoritic impacts. Because of their inexpensive, large-scale synthesis, potential for surface functionalization and high biocompatibility, nanodiamonds are widely investigated as a potential material in biological and electronic applications and quantum engineering. We have also been dealing with nanodiamonds in the Nuclear Physics Institute in recent years. The diamond powders were irradiated for the production of fluorescent nanodiamonds. Nanodiamond powders with a grain size of 5 – 45 nm were irradiated. N-V (nitrogen–vacancy) centers are created after irradiation. The photo-stable fluorescence in the visible and near infrared spectral range can be engineered in the fluorescent diamond nanoparticles (FDNs) by enrichment with color centers related to the point defects in the crystalline lattice.

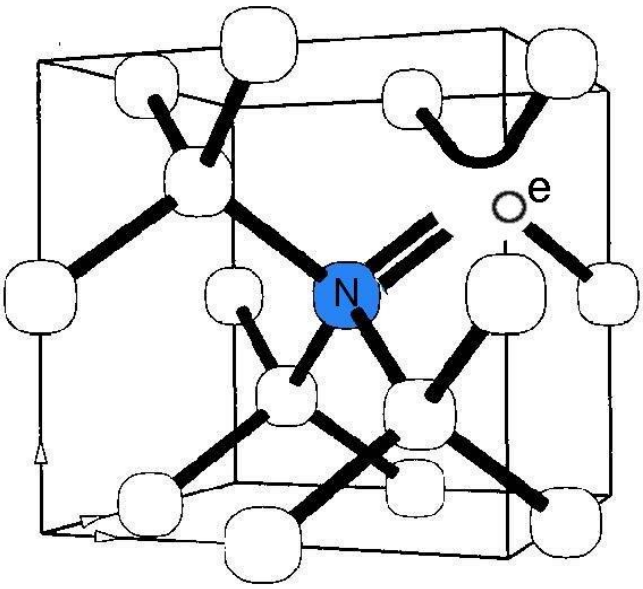


Figure 1. Formation of N-V centers, **N -** three electrons are covalently bound to the **C** atoms, two non-bonded (lone pair). **The vacancy -** three unpaired electrons: two make a quasi-covalent bond and one remains unpaired. **N-V^0** - one unpaired electron, paramagnetic. **N-V$^-$ -** electron located at the vacancy site - paired with one of the vacancy electrons.

The NV color center consists of a nearest-neighbor pair of a nitrogen atom in a substitution position and a lattice vacancy. It exists in two charge states, neutral (NV^0) and negative (NV^-), with ZPL (zero phonon line) emissions of 575 nm and 637 nm, respectively. NV color center in diamond exhibit following characteristics: (i) bright red fluorescence at room temperature, (ii) photostability showing no photobleaching typical for organic fluorophores or blinking typical for QDs (quantum dots), (iii) linearity of fluorescence intensity with NV concentration, in contrast to that of QDs, (iv) paramagnetic electron ground state making it accessible to optically detected magnetic resonance, and (v) chemically driven fluorescence linked to the surface chemical potential. After irradiation, the material is annealed at a temperature about 800 °C. The N-V centers show fluorescent properties after laser irradiation. Fluorescent nanodiamond is new material with good biocompability, great photostability and easy surface formability.

The most suitable method for the preparation of fluorescent diamond nanoparticles is the irradiation of nanodiamonds with high-energy particles from an accelerator and subsequent thermal annealing. Beams of protons, deuterons, alpha particles and electrons can be used for irradiation. At our institute, we use a beam of protons and ions from our cyclotron U120M and electron beams from Microtron MT25. Recently, neutron irradiation in a reactor channel has been tested.

Electron irradiation of nanodiamonds

In this work, we investigate the formation of NV color centers in diamond nanocrystallities using monoenergetictic electrons. Irradiation of nanodiamonds was performed with an electron accelerator microtron MT25 located in Prague. The microtron MT 25 installed at the Nuclear Physics Institute of the Czech Academy of Sciences is a classical type of cyclic relativistic electron accelerator, see Fig. 2. In the vacuum chamber, the electrons follow circular paths with a common tangent point.

The accelerating cavity, which is excited by the radio frequency (RF) field, is located at this point. A LaB_6 hot cathode is used as the source of the electrons, and is installed on the inner wall of the cavity. Thus, the particles are accelerated by an almost constant RF field at almost constant frequency in a constant uniform magnetic field. The technical solution is briefly described in [1]. Electron beams are extracted with tunable discrete energies in the range 5–25 MeV, macro-pulse length is usually 3 μs with 423 Hz repetition rate. Average beam currents are standardly provided in the 0.1–30 μA range. The beam power reaches up to 600 W in long-term operation. The electron energy is almost monochromatic with dispersion tens of keV. Electron beam can be focusing to the required size by set of quadrupole lenses.

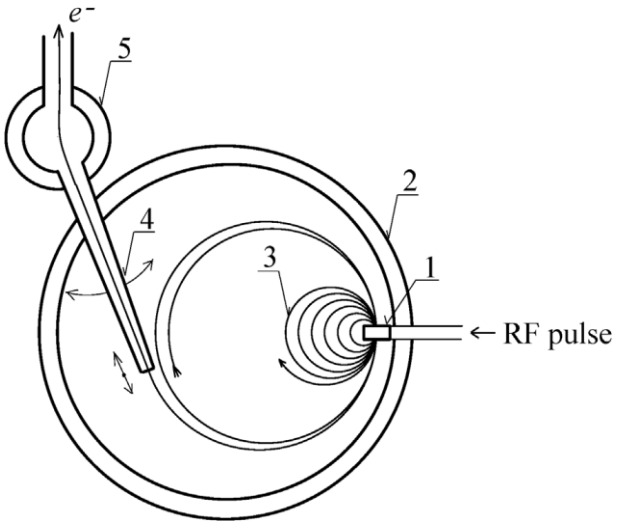


Figure 2 A schematic layout of the MT 25 microtron.
(1) Accelerating cavity with electron source, (2) vacuum chamber (magnet yoke), (3) electron trajectories (orbits), (4) adjustable beam extractor, (5) first beam deflector.

Setup of the target system for irradiations of nanodiamonds is shown in Fig. 3. The current of accelerated electrons it that passes through the input window of the target is measured by programmable logic controller (PLC) Tecomat TC700. The PLC provides integration of the current. PLC sampling frequency is in hundreds of Hertz. In each sample, actual current i_t and the sampling interval t_s are measured. Total charge density is therefore $Q = 2\Sigma i_t t_s$ [C/cm^2] for beam cross-section of 0.5 cm^2. Usable collimated current of accelerated electrons is about 15μA and the cross–section of input collimator of the target system is 0.5 cm^2, see Fig. 3. In the experiment, the energy of the accelerated electrons was 16,6 MeV with energy dispersion tens of keV, the mean beam current was about 15 μA. Achieved charge in the target material was from 0,7 to 4 C/cm^2. The sample of nanodiamonds was placed in fresh water cooled target. A collimator with 8 mm diameter was placed in the front line of the target, the shape of the hole is identical the shape of the target. The target allows to irradiate nanodiamonds with sample mass up to 1,5 g.

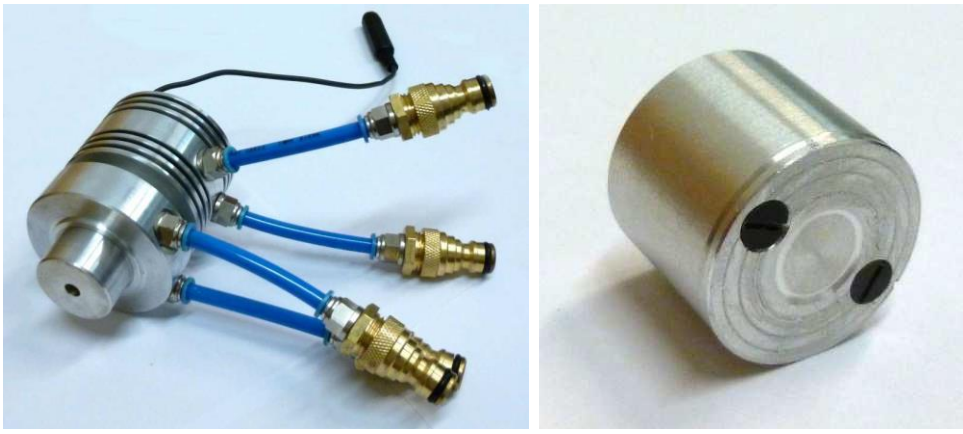


Figure 3 Water cooling target system and inner box for nanodiamonds.

Cross-section of input collimator of the target system standardly used at Microtron laboratory is about 0.5 cm^2, see Fig. 3. Nanodiamonds are pressed into Al box with a bulk density of about 2 g/cm^3.

Simulation of radiation damage was performed in FLUKA, a general purpose Monte Carlo code for calculations of particle transport and interactions with matter, covering an extended range of applications [2]. Simulation calculates the displacement per atom (dpa) that is the unit frequently used for measuring the radiation damage. For example, dpa = 3 means each atom in the material has been displaced from its site within the structural lattice of the material an average of 3 times. Thus, the dpa is a measure of the amount of radiation damage in irradiated material. Simulations were aimed to estimate the appropriate ways of nanodiamond irradiation. Firstly, the dependence of vacancy number on primary electron energy has been studied. Energy change between 8 and 22 MeV causes small change of vacancy formation. This is also confirmed by experiments, see Table 1. However, the energy of the accelerated electron strictly affects amount of irradiated material.

Table 1 Dependence of the displacement per atom (dpa) and the relative photoluminescence related to the water Raman signal (PL/Raman) on primary electron energy. Electron irradiation charge density was 1.3 C/cm^2. NDs target thickness was 14 mm.

el. energy [MeV]	dpa per electron	PL/Raman [au]
8.0	$2.22 \cdot 10^{-23}$	16.2
9.8	$2.26 \cdot 10^{-23}$	19.5
16.6	$2.35 \cdot 10^{-23}$	20.1
21.3	$2.38 \cdot 10^{-23}$	16.3

The steady state photoluminescence spectra (PL) of the FDNs aqueous colloid dispersion with concentration 1 mg/ml are shown in Fig. 4. The spectra were excited by continuous 50 mW green laser at 532 nm and collected with the step 2 nm and spectral resolution 4 nm. The non-irradiated sample shows low photoluminescence comparable with the Raman signal of water with a broad band centered at 650 nm. The water Raman signal is thus added to all spectra measured in colloid dispersion. The neutral (NV^0) and with ZPL emission at 575 nm is clearly distinguishable whereas the peak related to the negative charged (NV^-) color center is not distinguishable in our spectra due to the superposition with water Raman band. Figure 4 also shows the broad vibronic side bands up to near infrared spectral range above 800 nm [3]. The PL intensity integrated in the broad spectral range 540–820 nm clearly shows the linear increase with the electron irradiation charge density. Therefore, the prolonged electron irradiation provides an approach how to prepare the

FNDs with bright fluorescence. Comparing the measured PL intensities, we estimate that the highest electron fluence 3 C/cm^2 investigated in this experiment creates about three NV centers per diamond nanocrystal with 45 nm diameter. Taking into account that the nanocrystal may contain thousands of N atoms, it is clear that we are still far below the maximum charge density which would lead to saturation of NV concentration and consequently the saturation of the fluorescence intensity. We conclude that the prolonged electron irradiation provides a way how to significantly enhance the number of NV centers in nanodiamond crystallites and their photoluminescence brightness [4]. Another idea to increase the number of NV centers was irradiation at different target temperatures. First, water cooling target system was modified to be cooled with liquid nitrogen. Second, an irradiation vacuum chamber was made for high temperature irradiation up to 900 °C. Although the first method led to a certain increase in the numbers of NV centers, cooling the target with liquid nitrogen for several hours is quite technically demanding. The second method led to a significant increase in the number of N-V centers.

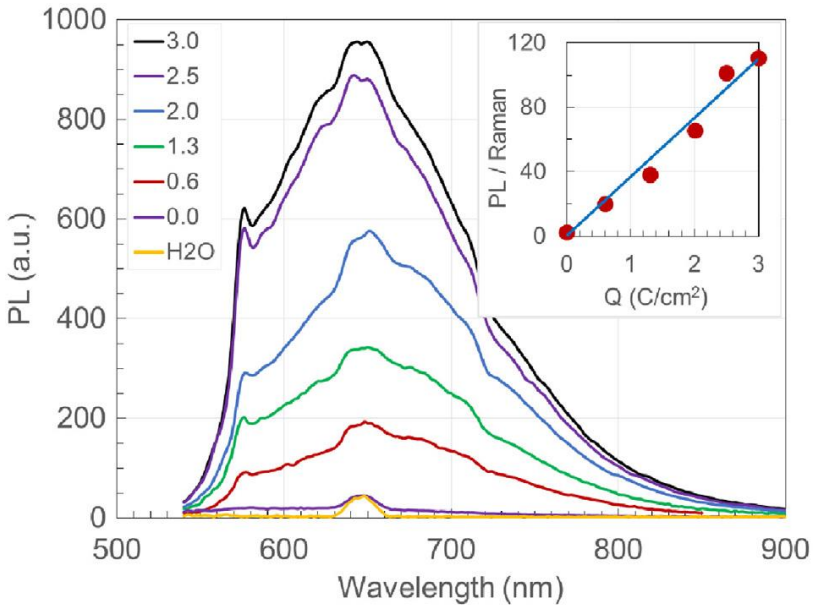


Figure 4 The room temperature steady state photoluminescence spectra (PL) of FNDs in water colloid dispersion 1 mg/ml after electron irradiation at 16.6 MeV with charge density 0–3 C/cm^2. The inset shows the ratio of the 540–820 nm integral photoluminescence and deionized water Raman signal (PL/Raman) as a function of electron irradiation charge density Q.

Conclusions

A relatively large number of nanodiamond samples were irradiated on a microtron. After irradiation, the NV color centers have been activated by the high temperature vacuum annealing followed by the oxidation and sonification to remove sp^2 carbon from the surface and to form stable colloid dispersion of fluorescent

diamond nanoparticles in water with concentration 1 mg/ml. Annealing and all chemical work were performed by colleagues from the Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the CAS. The steady state photoluminescence spectra excited by green laser show bright fluorescence in red spectral range linearly increasing with electron charge density irradiation. Irradiation of nanodiamonds at high temperature further increases photoluminescence. For most biological applications, an electron fluence of 2 C/cm^2 at electron energy 16.6 MeV is perfectly sufficient. For some special applications, the irradiation time may be prolonged. Increasingly efficient production of fluorescent nanodiamonds and improving their applications in biotechnology and biomedicine could improve diagnostics and therapy. It could also help in our understanding of biological processes. It is clear that not all the directions being explored will eventually go into practice. In any case, nanodiamonds have a great future in this area. There are a number of other applications in which nanodiamonds appear. One of them is, for example, the preparation of a very durable lubricant, which is obtained by mixing molybdenum disulfide and nanodiamonds. The resistance of such a lubricant considerably exceeds that of those currently used. And there are many more similar interesting possibilities. I hope that I have succeeded in showing that nanodiamonds are among the most promising new materials that may lead to a number of technological breakthroughs in the future. They are sure to have huge potential.

[1] M.Vognar, C.Simane, A.Burian, and D.Chvatil, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, 380 (1996).
[2] T. T. Bohlen, F. Cerutti, M. P. W. Chin, A. Fass, A. Ferrari, P. G. Ortega, A. Mairani, P. R. Sala, G. Smirnov and V. Vlachoudis, Nucl. Data Sheets 120, 211 (2014).
[3] S. Koizumi, C. E. Nebel, and M. Nesladek, Physics and Applications of CVD Diamond (Wiley-VCH, Weinheim, 2008).
[4] Z. Remes, J. Micova, P. Krist, D. Chvatil, R. Effenberg, and M. Nesladek, Phys. Status Solidi A, 1, 6 (2015).

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ СПЕКТРАЛЬНИХ КОЕФІЦІЄНТІВ ШАРУВАТИХ ОПТИЧНИХ СИСТЕМ

О.В.Міца, В.М.Рубіш, В.В.Красніков

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail:alex.mitsa@gmail.com

Задачі розпізнавання відносяться до найбільш складних обернених задач, пов'язаних з оптичними системами. Згідно постановки задачі потрібно відтворити за експериментальними даними спектральних характеристик в найпростішому ступінчастому наближенні профіль показника заломлення плівки після опромінення. Цей профіль під дією зовнішніх чинників змінюється і потрібно відповісти, в яких областях плівки відбулися найсуттєвіші зміни показника заломлення.

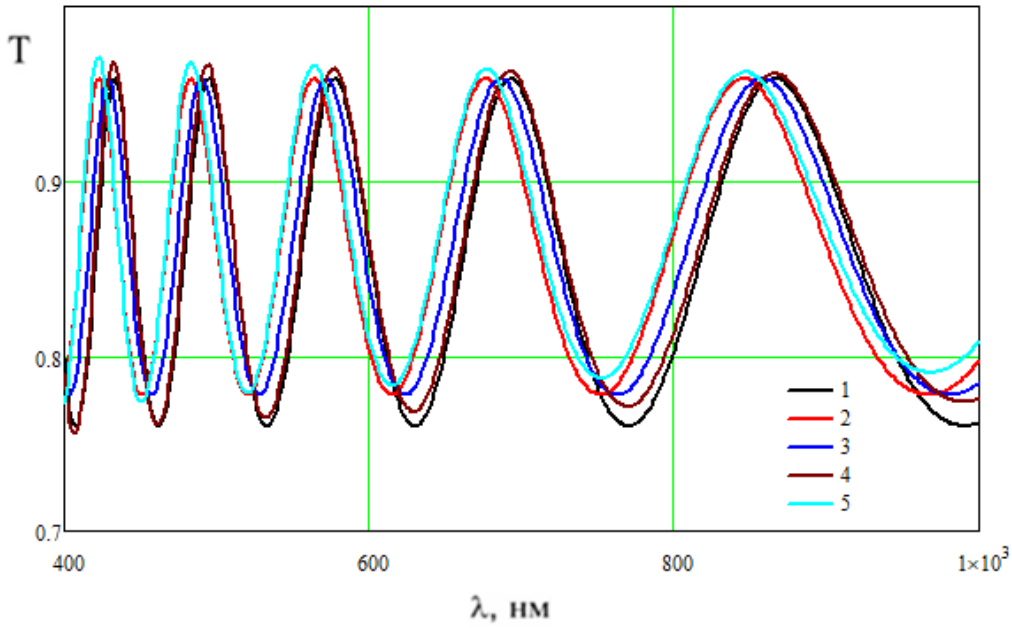


Рис.1. Модельні спектри пропускання плівки GeS_2 до і після опромінення:
1 – свіженапилена однорідна плівка GeS_2, показник заломлення 2.1
2 – опромінена плівка GeS_2, при умові однорідної зміни по всій товщині показника заломлення з 2.1 до 2.05 при опроміненні (без зміни товщини плівки по відношенню до свіженапиленої плівки);
3 – опромінена плівка GeS_2 з показником заломлення 2.05 і ростом товщини всієї плівки на 12 нм по відношенню до свіженапиленої;
4 – опромінена плівка GeS_2 з показником заломлення 2.05, ростом товщини на 12 нм, і сформованим перехідним шаром товщиною 10 нм і показником заломлення 2.4 (товщина перехідного шару віднімалася від загальної товщини фотовидовженої плівки);
5 – опромінена плівка GeS_2 з показником заломлення 2.0, ростом товщини на 12 нм, і сформованим перехідним шаром товщиною 10 нм і показником заломлення 2.4 (товщина перехідного шару віднімалася від загальної товщини фотовидовженої плівки).

Ми виходили з того, що відтворений профіль показника заломлення повинен базуватися на експериментальних даних по дослідженню спектрів пропускання плівки після опромінення.

При **фотопросвітленні** халькогенідної плівки і умови зміни показника заломлення (n) від 2.1 до 2.05 по всій її товщині, модельний спектр демонструє ріст T_{min}, тоді як T_{max} залишається на рівні пропускання однієї поверхні підкладинки. Такий же рівень T_{max} пропускання має модельна свіженапилена плівка з показником заломлення 2.1 (рис.1, крива 2). При умові незмінності геометричної товщини плівки при опроміненні, значення пропускання в інтерференційних мінімумах зростає, а їх положення, внаслідок зменшення оптичної товщини (зменшенні показника заломлення від 2.1 до 2.05), зміщуються від λ_{01}=630 нм до λ_{02}=615 нм. Легко бачити, щоб мінімум λ_{02} перемістився до положення λ_{01}, (як у експериментальному спектрі) необхідно, щоб геометрична товщина плівки збільшилась від 825 до 845 нм, тобто зросла на 20 нм. Тобто наближення мінімумів в шкалі довжин хвиль опроміненої і свіженапиленої плівки можливе лише в тому випадку, коли геометрична товщина плівки в процесі опромінення зростає. При цьому чисельне значення T_{min} в модельній опроміненій плівці залишається вищим, ніж чисельне значення пропускання в мінімумі свіженапиленої плівки (див. рис.1).

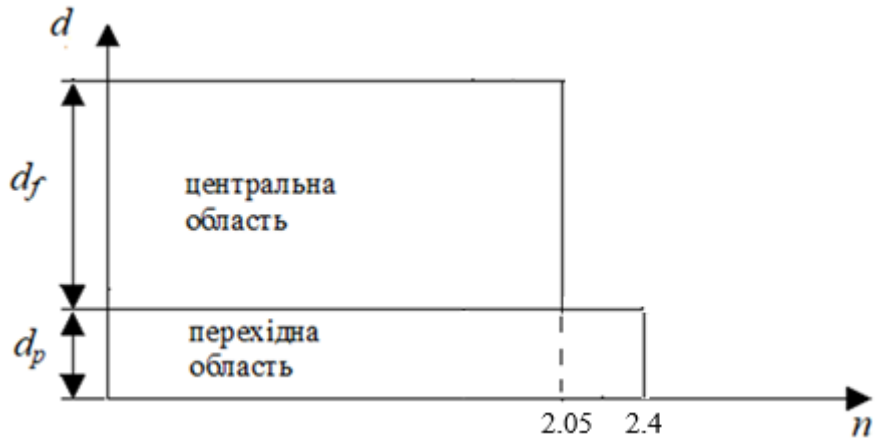


Рис.2. Відновлений профіль показника заломлення опроміненої плівки GeS_2 у вигляді центральної частини з показником заломлення 2.05 і перехідної області.

Зростання T_{max} і зменшення T_{min} в області 400-1000 нм модельної плівки можливе при формуванні перехідного шару (рис.1, крива 4) і узгоджується з ростом T_{max} в експериментальному спектрі дисульфіду германію. Цей факт може свідчити про формування в опроміненій плівці області з більшим показником заломлення на межі розділу плівка-підкладинка. Утворення такої неоднорідної області з відповідною зміною n може стати можливим при

протіканні процесу масопереносу в плівці при опроміненні. Найкраще узгодження модельного і експериментального спектрів при лазерному опроміненні плівки дисульфіду германію досягається при показнику заломлення центральної частини опроміненої плівки 2.05, росту її товщини при опроміненні на 18 нм, формуванням перехідного шару з показником заломлення 2.4 і розміром 10 нм (рис. 2) .

Під час експонування халькогенідної плівки As_2S_3 (n свіжонапиленої плівки 2.3) відбувається **фотозатемнення** і край поглинання зсувається в область довгих хвиль. При цьому розмах коливань зменшується. Відомо, що під час опромінення плівки на її поверхні формується миш'якозбагачений приповерхневий шар з більшим показником заломлення. Для порівняння модельних і експериментальних даних нами взятий спектральний діапазон від 500 до 750 нм. Будемо почергово вводити параметри і досліджувати їх вплив на спектральні характеристики опроміненої плівки, звертаючи особливу увагу на два показника, які потрібно досягнути:

1) зменшення розмаху коливання;
2) зсув максимумів в область довгих хвиль.

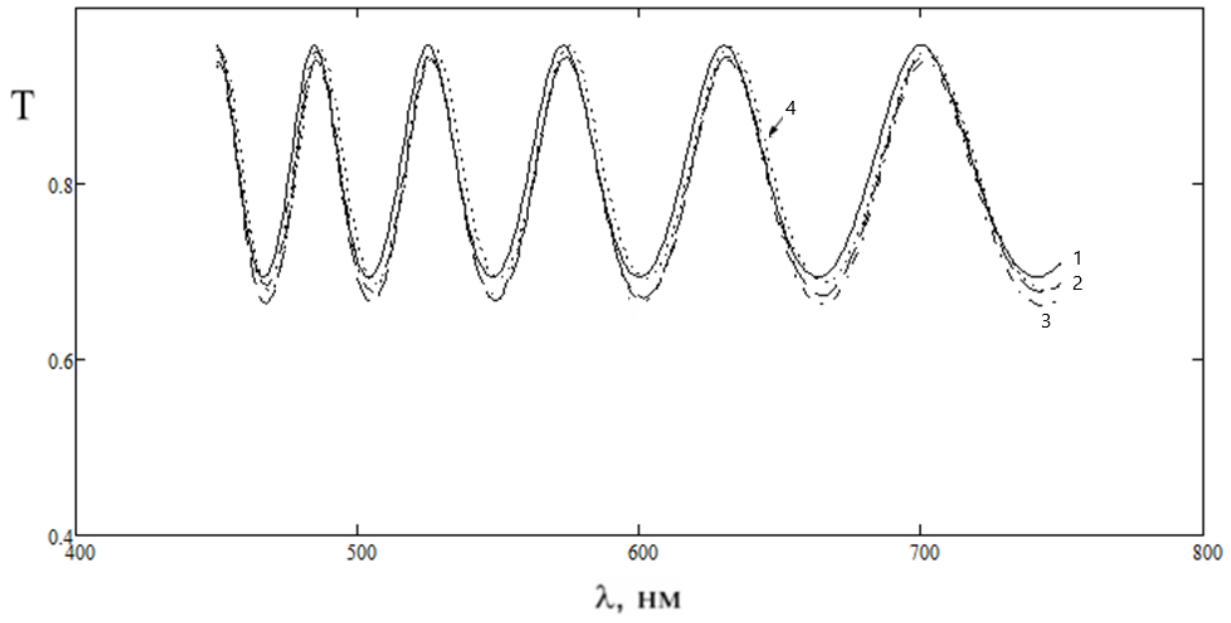


Рис. 3. Спектральні характеристики плівки As_2S_3 при наявності приповерхневого шару, нм: 1 – 0; 2 – 40; 3 – 80; 4 – 120.

Промоделюємо вплив приповерхневого шару з показником заломлення 2.4 на спектральні характеристики, змінюючи його розмір з невеликим кроком. Показник заломлення 2.4 прийнятий рівним показнику заломлення об'ємного скла . Як видно з рис.3, з ростом приповерхневої області положення максимумів і мінімумів здійснюють незначні коливні рухи вверх-вниз. При

цьому спостерігається незначний зсув максимумів в область довгих хвиль. Із ростом часу опромінення очікувалось збільшення приповерхневої області від 0 до 300 нм. З кроком 1 нм, були проведені розрахунки спектральних характеристик плівок As_2S_3. Одержані результати дозволяють стверджувати:

Твердження 1. Збільшення часу експонування плівки As_2S_3 призводить до зростання розміру приповерхневої області, показник заломлення якої більший, ніж у центральній частині плівки.

З іншого боку, як видно з рис. 3, наявність приповерхневого шару не призводить до зменшення розмаху коливання. Відповідно, потрібно включити додатковий параметр в модель, яка повинна включати перехідний шар. Виходячи з відомих експериментальних даних, це ріст геометричної товщини плівки. Випадок, коли геометричні розміри плівки при експонуванні зменшується, було відкинуте, оскільки у такому випадку відбувався суттєвий зсув в область коротких хвиль.

Зростання товщини плівки навіть на величину 1/10 від розмірів приповерхневої області призводить до більш суттєвого зсуву в область довгих хвиль, ніж тільки наявність приповерхневої області. Однак, одержавши достатній зсув в область довгих хвиль, все одно основним недоліком розглядуваної моделі залишалось те, що розмах коливання не зменшувався. Випадок, коли розмір плівки при експонуванні зменшується, було відкинуте, оскільки у такому випадку відбувався суттєвий зсув в область коротких хвиль.

Зростання товщини плівки навіть на величину 1/10 від розмірів приповерхневої області призводить до більш суттєвого зсуву в область довгих хвиль, ніж тільки наявність приповерхневої області. Однак, одержавши достатній зсув в область довгих хвиль, все одно основним недоліком розглядуваної моделі залишалось те, що розмах коливання не зменшувався. У зв’язку з цим, в модель потрібно ввести додатковий параметр. Тому окрім приповерхневого, було введено ще й перехідний шар, який знаходиться на межі плівка-підкладинка. Показник заломлення цієї області не може бути більшим, ніж показник заломлення плівки по двом причинам. По-перше, може відбутися збільшення показника заломлення приповерхневої області за рахунок відомого явища мас-транспорту. По-друге, уже з позицій моделювання спектрів пропускання можна сказати, що збільшення показника заломлення буде призводити до збільшення розмаху коливання. Відповідно, показник заломлення перехідної області може бути лише меншим показника заломлення центральної частини плівки. Для проведення обчислювального експерименту було взято значення показника заломлення перехідної області рівне 2.2.

Після проведення обчислювального експерименту можна заключити:

Твердження 2. Для плівки As_2S_3 збільшення її розмірів, наявність перехідної приповерхневої області з показником заломлення більшим та області з показником заломлення меншим, ніж в центральній частині плівки, що пов'язане з тривалим експонуванням, приводить до зменшення розміру розмаху коливання.

Було використано для пошуку оптимальних параметрів цієї задачі метод Хука-Дживса. Починаючи з випадково вибраної базисної точки, будемо виконувати серію "пробних рухів": розглядаються вдалі в розумінні зменшення цільової функції кроки по координатним напрямкам.

Рис. 4. Модель-розв'язок розглядуваної задачі розпізнавання профілю показника заломлення опроміненої плівки As_2S_3.

Після проведення розрахунків було отримано такі квазіоптимальні значення шуканих параметрів (рис. 4): $dv \approx 20$ нм, $dp \approx 30$ нм, $\Delta d \approx 8$ нм, які дозволяють відтворювати експериментальні спектральні характеристики опромінених протягом 5 хв. плівок As_2S_3. Для відтворення спектральних характеристик плівки, опроміненої протягом 10 хв., значення цих параметрів наступні: $dv \approx 120$ нм, $dp \approx 60$ нм, $\Delta d \approx 12$ нм. Тобто одним з варіантів для вибраної товщини плівки може бути розмір приповерхневої області приблизно 120 нм з показником заломлення 2.4, розмір перехідної області приблизно 60 нм з показником заломлення 2.2 (рис. 4). Зростання товщини плівки після експонування при цьому приблизно рівне 12 нм.

ІЗОМЕРНІ ВІДНОШЕННЯ У РЕАКЦІЇ ^{121}Sb(γ,5n) ^{116m,g}Sb

В.І.Берест[1], О.А.Безшийко[1], О.М.Водін[2], Л.О.Голінка-Безшийко[1], І.М.Каденко[1], К.О.Крячок[1], В.А.Кушнір[2], В.В.Мітроченко[2], С.М.Олійник[2], С.А.Пережогін[2], C.Vallerand[3]

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ
[2]НДК "Прискорювач" ННЦ ХФТІ НАН України, Харків
[3]Laboratoire de l'Accélérateur Linéaire (LAL), Orsay, France
e-mail: lyalkagb@gmail.com

Метод ізомерних відношень - один із найпотужніших і методично простих методів для дослідження характеристик структури ядра та механізмів ядерних реакцій. Даний метод широко використовується для дослідження продуктів реакцій з важкими іонами, спонтанного поділу, реакцій фотоподілу, фотоядерних реакцій (γ,γ') із заселенням дискретних рівнів.

Використання високоенергетичних гамма-квантів як налітаючих частинок в ядерних реакціях має деякі істотні переваги для вивчення ядерної структури та механізмів ядерних реакцій. В енергії збудження складеного ядра відсутня енергія зв'язку налітаючої частинки, гамма-кванти не вносять великого кутового моменту в ядро. Наявність прискорювачів з регульованою енергією гамма квантів дає можливість для проведення таких досліджень.

Саме завдяки останній особливості дуже детально досліджено діапазон енергій в околі гігантського дипольного резонансу (ГДР) та в області енергій вище порогу утворення піонів. Натомість область енергій від 30 до 100 МеВ досліджена набагато менше, в основному через те, що значення перерізів в цьому діапазоні дуже малі і інтенсивних джерел гамма-квантів з можливим плавним регулюванням енергії не так багато.

У рамках цієї роботи проведено вимірювання ізомерних відношень для ядра ^{116m,g}Sb, що є продуктом фотоядерної реакції (γ,5n) на ^{121}Sb. Опромінення проводилося гамма-квантами гальмівного спектра з граничною енергією до 74.8 МеВ. Джерелом гамма-квантів слугував прискорювач електронів ЛУЕ-40 НДК «Прискорювач» ННЦ ХФТІ. Гальмівна мішень представляла собою танталову пластину, товщиною 1,05 мм. Для вимірювання наведеної γ-активності зразків використовувався спектрометр на базі напівпровідникового HPGe-детектора з відносною ефективністю 20% і енергетичною роздільною здатністю 1,9 кеВ для γ-лінії 1332 кеВ ^{60}Co.

В роботі ізомерне відношення розраховувалось як відношення виходу реакції з утворенням кінцевого ядра у стані з вищим спіном до виходу реакції з утворенням кінцевого ядра у стані з нижчим спіном $D = \frac{Y_H}{Y_L}$. Оскільки метастабільний стан ядра ^{116m,g}Sb має спін та парність – 8^-, а основний стан має спін та парність – 3^+, то для продукту реакції ^{121}Sb(γ,5n)^{116m,g}Sb ізомерне

відношення визначається як відношення виходу метастабільного стану ядра до основного.

Проведено порівняння отриманого ізомерного відношення для продуктів реакції $^{121}Sb(\gamma,5n)^{116m,g}Sb$ з експериментальними даними для цієї реакції, взятими з бази даних EXFOR [1], та результатами розрахунків для 6 моделей, які виконано з використанням коду TALYS [2]. Експериментальне значення добре узгоджується з даними з бази даних [1] та теоретичними розрахунками (див. Рис. 1).

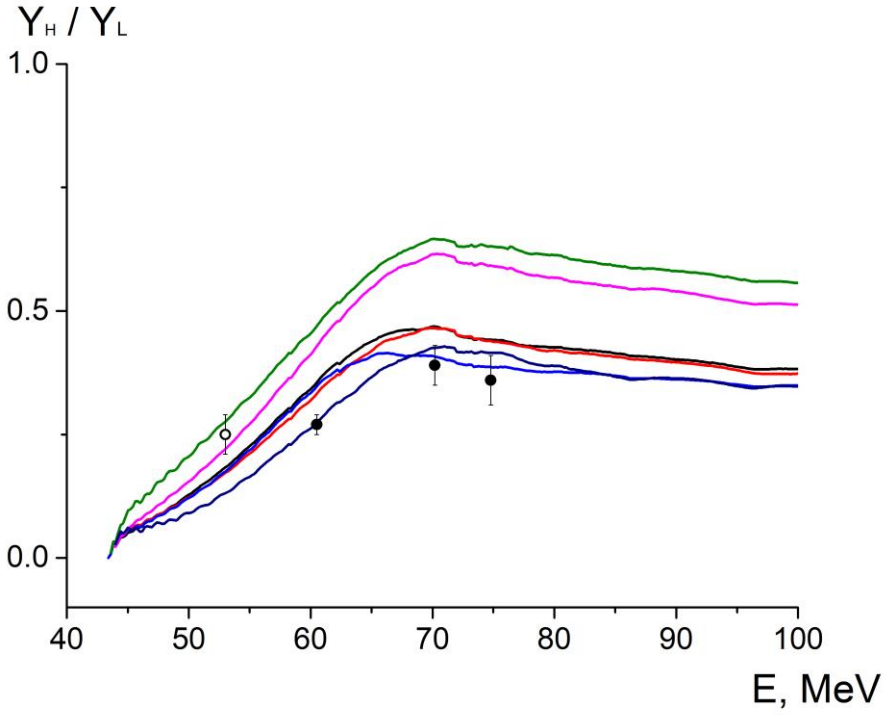


Рис. 1. Залежності $Y_H(E_\gamma)/Y_L(E_\gamma)$ від максимальної енергії γ-квантів для гальмівного спектра та розрахованих з використанням коду TALYS для $^{116m,g}Sb$ продукту реакції $^{121}Sb(\gamma,5n)^{116m,g}Sb$. Суцільні кола – дані, отримані автором, порожнє – дані, взяті з [1], кольорові лінії – розрахунки для 6 моделей з використанням коду TALYS.

Наукова робота авторів з Київського національного університету імені Тараса Шевченка і LAL проводилася в рамках міжнародної асоційованої лабораторії LIA IDEATE.

[1] [Електронний ресурс]: Experimental Nuclear Reaction Data / https://www.nndc.bnl.gov/exfor/exfor.htm
[2] A.J. Koning, S. Hilaire, M.C. Duijvestijn. AIP Conf. Proc. 769, 1154.

ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ СПІКАННЯ НА ЕЛЕКТРИЧНУ ПРОВІДНІСТЬ КЕРАМІКИ з ZnO

Є.М.Островерх[1], Л.Л.Коваленко[2], А.В.Самелюк[1], М.М.Бричевський[1], Н.О.Лисуненко[1], О.Д.Васильєв[1], А.С.Островерх[1]

[1]Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Київ
[2] Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України, Київ
e-mail: anna.ostroverkh84@gmail.com

Розвиток водневої енергетики потребує впровадження широкого використання найефективнішого перетворювача енергії, а саме паливної комірки (ПК).

Серед розмаїття ПК керамічні паливні комірки (КПК) з твердооксидним керамічним електролітом відносять до найефективніших перетворювачів енергії, але порівняно висока робоча температура (600-900 ºС) уповільнює широке впровадження енергетичних систем на їхній основі.

В роботі проведено дослідження електропровідності оксид-цинкової кераміки у вигляді дисків для застосування в КПК в якості електроліту [1]. Зразки кераміки діаметром 15 мм і товщиною 2 мм одержували одновісним пресуванням при тискові ~30 МПа з подальшим спіканням в інтервалі температур 800 – 1250 °С зі швидкістю нагріву 200 град/год та з ізотермічною витримкою 2 год у повітряній печі VMK 1600, Linn High Therm (Німеччина) без додавання будь-яких домішок, які б впливали на спікання. Було використано два типи нанопорошку різної розмірності та чистоти: тип I та тип II. Порошок типу I містить практично вдвічі менші за розміром частинки і вцілому значно чистіший за порошок типу II. Найбільшими за вмістом домішками у порошку типу I є Cd, Ni та S, а у порошку II типу - лужні метали Ca, Na та Pb.

Дані щодо електричної провідності обох ZnO керамік, спечених за різних температур, представлені на рис. 1 в координатах рівняння Арреніуса. Зазвичай, ці залежності є лінійними в доволі широких інтервалах температур. Тому методично доволі легко можна вираховувати енергію активації термоактивованих процесів, якими і є дифузія йонів кисню та електронів у оксидних кераміках.

Порівнюючи ZnO кераміки обох типів зазначимо, що провідність ZnO кераміки з порошку типу I є дещо вищою, ніж кераміки типу II. ZnO кераміка типу I, спечена при 1200 ºС, досягає своєї максимальної провідності вже при температурі випробування 265 ºС, де вона становить $8{,}54\cdot10^{-3}$ См/см. ZnO кераміка типу II показує свою максимальну провідність, яка становить лише $1{,}6\cdot10^{-3}$ См/см, при значно вищій температурі, а саме при 600 ºС, але будучи спеченою при значно нижчій температурі – при 1000ºС.

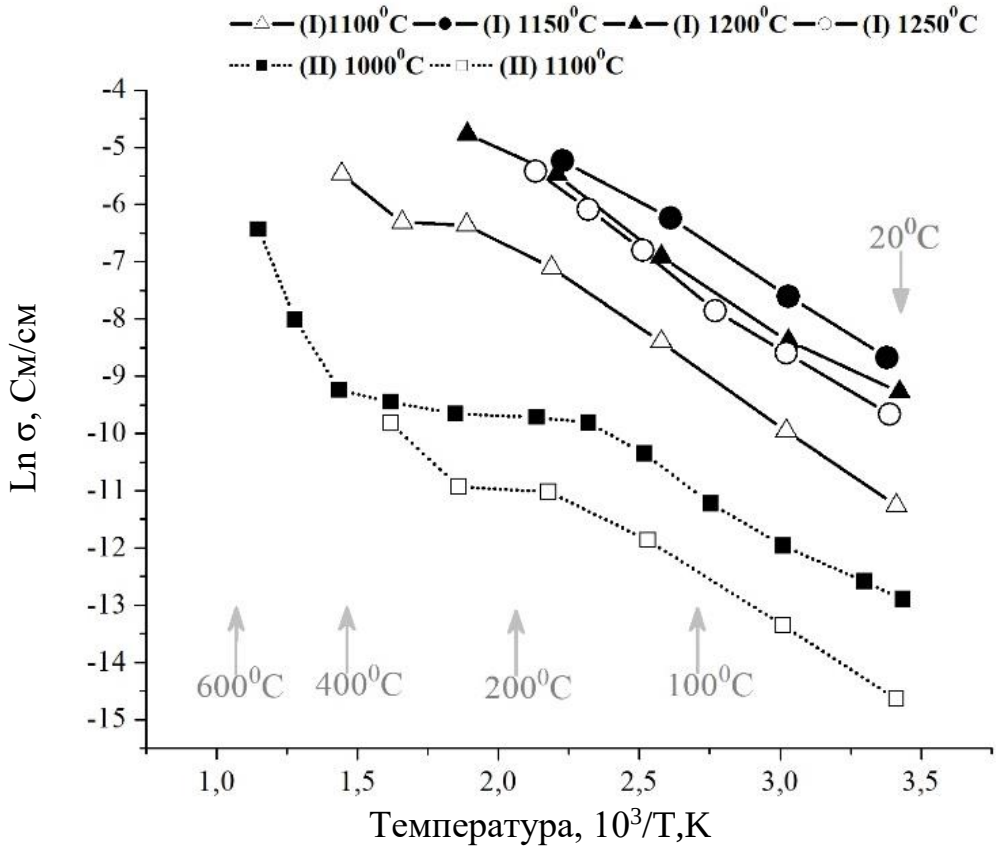


Рис. 1. Електрична провідність зразків ZnO кераміки типу I та типу II, спечених при різних температурах (вказані зверху) [2].

На представлених на рис. 1 кривих електричної провідності ZnO кераміки прослідковується складна поведінка, яка залежить від температури спікання, що відповідає за формування структури матеріалу, тому потрібне ретельне вивчення будови кераміки і вплив на складові її провідності. Крім того, важливим параметром впливу на електричну провідність оксид-цинкової кераміки є тиск при формуванні зразків.

[1] Chen Xia, Zheng Qiao, Chu Feng, Jung-Sik Kim, Baoyuan Wangand Bin Zhu, Study on Zinc Oxide-Based Electrolytes in Low-Temperature Solid Oxide Fuel Cells, Materials 11, 40 (2018).

[2] Є.М. Островерх, І.О. Полішко, Д.М. Бродніковський, Л.Л. Коваленко, А.В. Самелюк, О.Д. Васильєв, А.С. Островерх, Механічна поведінка та електрична провідність оксид-цинкової кераміки, UM 1, 14 (2020).

КАТАЛІТИЧНИЙ ШАР ВОДНЕВОЇ ПАЛИВНОЇ КОМІРКИ

А.С.Островерх[1], М.Дубау[2], Є.М.Островерх[1]

[1]Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Київ
[2]Карлів університет, Прага
e-mail: anna.ostroverkh84@gmail.com

На межі XXI століття проблеми споживання ресурсів планети становлять загрозу самому існуванню людини. За умов зростаючого споживання енергії перехід на «водневу енергетику» і, відповідно, на «водневу економіку» є неминучим для виживання людини, оскільки лише технології, які не забруднюють довкілля, дають шанс людству і екосистемі планети Земля на існування.

Отримання енергії з перетворення водневого палива дозволяє задовольнити величезні сучасні та майбутні енергетичні потреби. Становлення водневої ери, заснованої на використанні водню та сполук, які містять водень, для отримання енергії і забезпечення нею усіх потреб, є першочерговим завданням. Тому розробка, оптимізація і виробництво паливно-комірчаних (ПК) пристроїв з використанням водню та виробництво самого водню є першочерговим завданням дослідників щодо широкого запровадження їх у повсякдення. Серцем типової ПК з полімерним електролітом є мембранний комплекс, який складається з мембрани полімерного електроліту та двох електродів (анод та катод). Електрохімічні реакції відбуваються в примембранній області в об’ємі каталітичного шару (КШ), який разом з мікропоруватим шаром та газодифузійнім шаром формують електрод ПК. Зокрема, КШ має тонкі трифазні межі, де відбуваються електрохімічні реакції. Кожен КШ складається з електропровідної фази каталізатора, йонно-провідної полімер-електролітної фази та пористої фази транспортування реагенту.

Стандартний КШ отримується з каталітичних чорнил, основою яких є каталітичний матеріал та компонент електроліту. Наприклад, для ПК з полімерним електролітом, каталітичний матеріал - це наночастинки Pt чи наночастинки Pt на вуглецевому носії. Для досягнення стабільного перебігу окисно-відновних реакцій у робочих (демонстраційних) електрохімічних пристроях кількість платини становить 1-4 мг см$^{-2}$ на кожному з електродів ПК. В наукових дослідженнях, особливо в тестах на стабільність роботи ПК, вміст платини складає від 0,4 - 0,8 мг см$^{-2}$ і більше. КШ для полімерної ПК є гідрофільним шаром, оскільки містить компонент полімерної мембрани. Для визначення кінетики та механізмів окисно-відновних реакцій ПК у реальних умовах електрохімічного перетворення для подальшої оптимізації вмісту каталітичного матеріалу (платини) потрібно визначити мінімально необхідну кількість цього матеріалу, яка забезпечує стабільну потужність ПК на рівні з комерційно наявними ПК (вміст платини становить від 0,4 мг см$^{-2}$). На теперішній час більшість рішень, пов’язаних зі зниженням вмісту платини в реальних умовах ПК, орієнтовані на таких дослідженнях КШ: збільшення

кількості вуглецевого носія, внесення додаткових гідрофобних/гідрофільних компонентів, зміна розмірності каталітичного матеріалу і носія та багато інших. На жаль, такі дослідження досі не вирішують питання забезпечення ефективного перебігу окисно-відновних реакцій на електродах ПК з низьким вмістом платини. За даними Американського енергетичного агентства DOE, відсоток каталітично активної платини в КШ становить < 50%. На рис. 1.а схематично представлено КШ, який складається з платинових частинок на вуглецевому носії, та схематично відображено КШ в реальних умовах ПК (рис. 1.б, в), коли кількість каталітично активного матеріалу значно зменшується. Стабільне електрохімічне перетворення на електродах ПК забезпечується постійним перебігом напівкомірчаних окисно-відновних реакції, початок яких відбувається на поверхні каталітичного матеріалу при постійному відведенні протонів та електронів до полімерного електроліту (Nafion^{TM}) та електронного провідника відповідно (частинки вуглецю). Тому каталітично активна платини виділена жовтим кольором, і відповідно коричневим – платина, яка не вносить вклад в ефективність електрохімічного перетворення ПК.

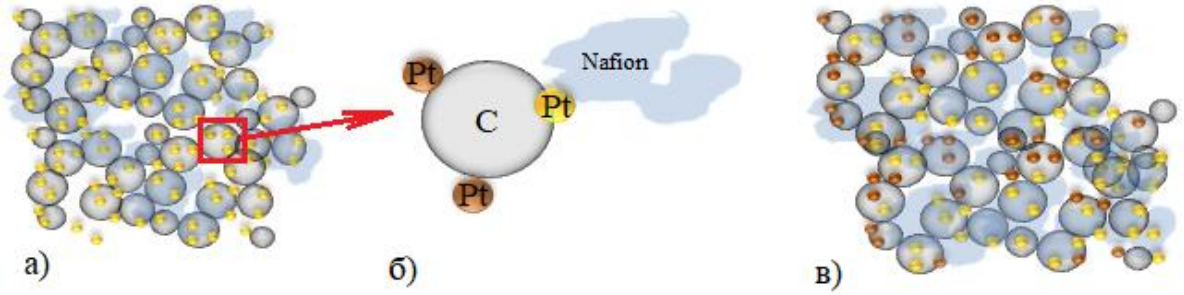


Рис. 1. Схематичне зображення каталітичного шару ПК: каталітично активна Pt (жовтий колір), неактивна Pt (коричневий колір), вуглець (сірий колір), полімерний компонент (Nafion^{TM}).

Зміна вмісту одного з компонентів чи додавання іншого структурно змінює весь КШ, тому дослідження процесів ПК в умовах низького вмісту каталітично-активного матеріалу становить складне завдання з багатьма невідомими.

Для забезпечення кількісного дослідження та оцінювання ефективності електрохімічного перетворення необхідно отримати ефективний перебіг електродних процесів, тобто отримати високе значення питомої потужності в реальних умовах ПК - від 0,1 Вт см$^{-2}$. Тому потрібно зосередитись на комплексному дослідженні ПК вцілому, зокрема отримати розвинену поверхню субстрату для нанесення КШ з платини. При цьому вимоги до матеріалу самого субстрату повинні відповідати властивостям електричної та, за необхідності, протонної провідності відповідно [1].

[1] A. Ostroverkh et al., International Journal of Hydrogen Energy 44, 35 (2018).

РОЗРАХУНОК ПЕРЕРІЗІВ ДВОЕЛЕКТРОННОГО ЗАХОПЛЕННЯ ПРИ ЗІТКНЕННІ АТОМІВ ГЕЛІЮ З АЛЬФА-ЧАСТИНКАМИ В РАМКАХ CDW-МЕТОДУ

В.В. Алексій, В.Ю. Лазур, С.І. Мигалина

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: vitaliy.aleksiy@uzhnu.edu.ua

Фізичні особливості процесів розсіювання атомних частинок при проміжних енергіях зумовлені сильним спотворенням електронних хвильових функцій внаслідок наявності далекодіючої кулонівської взаємодії між частинками, в результаті якої реальні переходи електронів з початкового в кінцевий стан супроводжуються масою інших, віртуальних, переходів.

Для опису цих специфічних особливостей кулонівської взаємодії використовують різні наближені варіанти шредінгерівського формалізму, найбільш популярним з яких є метод спотворених хвиль неперервного спектру (CDW) [1, 2]. Використання вказаного методу в задачах одноелектронної іонізації і одноелектронної перезарядки призводить до хорошого узгодження теорії з експериментальними даними при великих і середніх відносних швидкостях [3]. Успішне застосування CDW-методу багато в чому пов’язано з правильним врахуванням кулонівських асимптотичних умов в обох каналах реакції.

Успіхи, досягнуті у вивченні одноелектронних процесів перезарядки та іонізації на основі CDW-методу [1, 4], спонукали нас розробити шредінгерівский формалізм методу спотворених хвиль для опису процесів двоелектронного захоплення.

Отже, на основі інтегральних рівнянь Додда-Грайдера для системи чотирьох частинок описується простий формалізм, що використовується для аналізу процесу двоелектронної перезарядки при середніх і великих швидкостях відносного руху. Цей формалізм аналогічний формалізму CDW-методу [1, 4] для задачі одноелектронної перезарядки і виявляється лише трохи більш громіздким, ніж останній. Амплітуда реакції двоелектронного захоплення розраховується в наближенні механізму одночасного захоплення налітаючою частинкою двох електронів мішені.

Застосування загальної теорії проілюстровано на прикладі реакції двоелектронної перезарядки при зіткненні атомів гелію з альфа-частинками:

$$He^{2+} + He\,(1s^2) \rightarrow He\,(1s^2) + He^{2+}.$$

Результати обчислень перерізів добре узгоджуються з теоретичними та експериментальними даними (рис. 1).

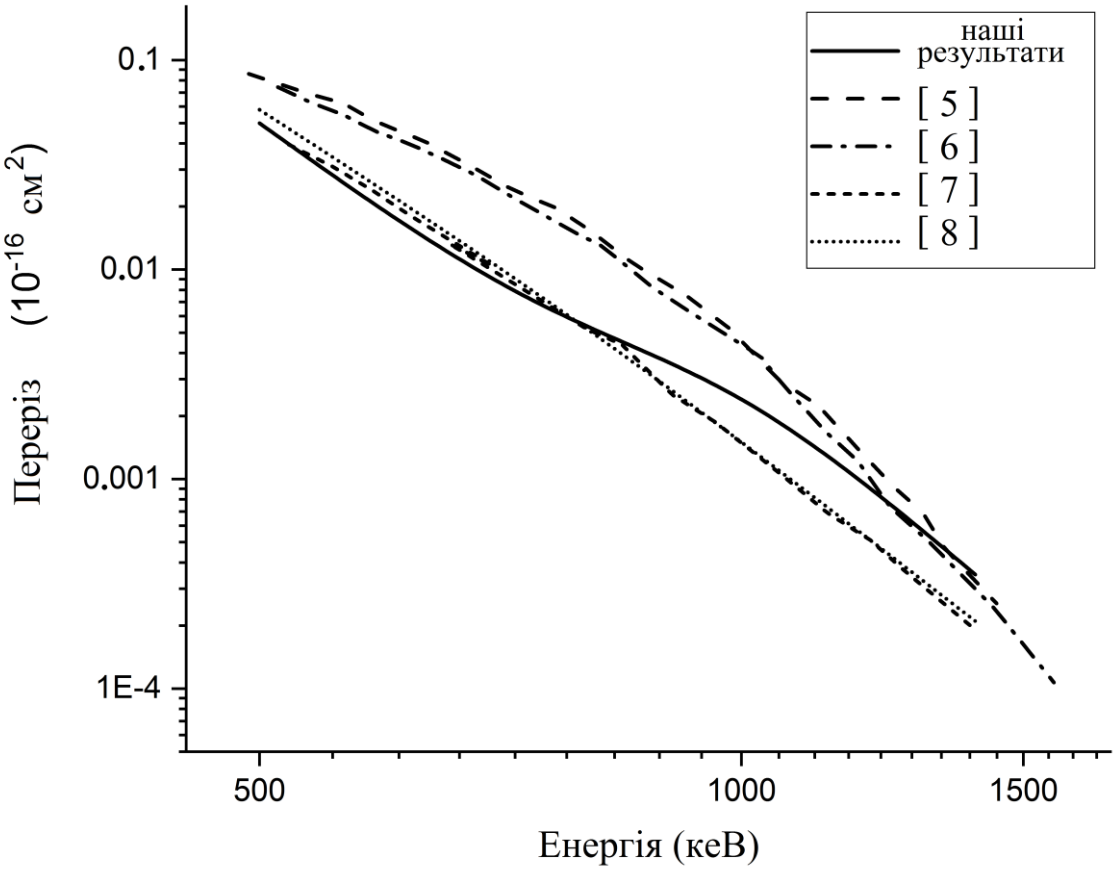


Рис. 1. Результати розрахунків перерізів двоелектронної перезарядки під час зіткнення атома гелію з α-частинками.

[1] V.Yu. Lazur, M.V. Khoma, Advances in Quantum Chemistry 65, 363 (2013).
[2] Dz. Belkic, R. Gayet, A. Salin, Phys. Rep. 56, 279 (1979).
[3] Dz. Belkic, Quantum theory of high-energy ion-atom collisions (Taylor & Francis, London, 2008).
[4] V.Yu. Lazur, V.V. Aleksiy, M.I. Karbovanets et al., SPQEO 22, 171 (2019).
[5] S. Ghosh, A. Dhara, C.R. Mandal, M. Purkait, Phys. Rev. A 78, 042708 (2008).
[6] M. Purkait, S. Sounda, A. Dhara, C.R. Mandal, Phys. Rev. A 74, 042723 (2006).
[7] M.S. Gravielle, J.E. Miraglia, Phys. Rev. A 45, 2965 (1992).
[8] D.S.F. Crothers, R. McCarroll, J. Phys. B 20, 2835 (1987).

ON THE FINE STRUCTURE OF THE DIFFRACTION CONE OF PROTON-PROTON AND ANTIPROTON-PROTON SCATTERING AT THE COLLIDER ENERGIES

N.Bence

Uzhhorod National University, Uzhhorod,
e-mail: bencenorbert007@gmail.com

In the elastic hadron-hadron scattering the knowledge of the fine structure parameters of diffraction cone such as the slope

$$B(s,t) = \frac{d}{dt}\left(\ln\frac{d\sigma(s,t)}{dt}\right) \tag{1}$$

and curvature

$$C(s,t) = \frac{1}{2}\left(\frac{d}{dt}B(s,t)\right), \tag{2}$$

where $\frac{d\sigma(s,t)}{dt}$ - differential cross-section, s, t – Mandelstam variables, are a sensitive indicators of the transition to the "asymptotic" regime.

Recently the TOTEM (CERN) experiment at $\sqrt{s} = 8$ [1] and 13 TeV [2] discovered the novel and unexpected non-exponential behavior of the diffraction cone of elastic pp differential cross-section. Below we propose a simple procedure to reveal the "experimental" curvature thanks to which we will be able to assess the onset of the mentioned regime. There we shall study the s - and t -behavior of slope and curvature within the framework of the phenomenological model which considers naturally the curvature as the revelation of the threshold behavior of the scattering amplitude in the t -channel and the shape of proton in the first cone region. To determine the interval of momentum transfer for the experimental data, where it is necessary to carry out the investigations, we shall use the experimental data points at given fixed energy normalized by a linear exponential $R(t)$. Within the boundaries the normalized differential cross-sections $R(t)$ has a concave form, where the approximation of the differential section by formula (3) is acceptable:

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = \mathrm{a}e^{\delta t+\gamma\sqrt{t_0-t}} \tag{3}$$

where a, δ and γ - fitted parameters, t_0 is the effective threshold, tending to the lowest 2-pion threshold. Within this model the slope and curvature may be defined with the help of eqs. (1) and (2). To look for the fine structure of the diffraction cone of pp and $\bar{p}p$ elastic scattering (as a sequent of such behavior) at LHC energies and close to it, we have separate those experimental data for pp and $\bar{p}p$ elastic scattering which contains sufficiently large number of experimental points. Namely we consider the energies: $E_{cm} = 546$ GeV for $\bar{p}p$ scattering, 7, 8 , and 13 TeV for pp scattering. The result of calculating the curvature for all the selected 5 sets by

model (3) is shown in Fig. 1. The next step is to choose the "effective" Pomeron contribution to the scattering amplitude, which corresponds to the observed behavior of the curvature $C(s,0)$. We will choose a common form of the Pomeron contribution to the cross-symmetric scattering amplitude as [3]:

$$A(s,t) = g(s)s^{\alpha_P(t)}e^{\varphi(t)}, \tag{4}$$

$$\alpha_P(t) = 1 + \alpha' t + \gamma\left(\sqrt{4m_\pi^2 - t} - 2m_\pi\right), \tag{5}$$

where $\alpha_P(t)$ is a non-linear Pomeron trajectory. Non-exponential residue function is

$$\varphi(t) = bt + \beta(\sqrt{4m_\pi^2 - t} - 2m_\pi), \tag{6}$$

where m_π is the mass of pion, $g(s)$ is an unknown parametric function,

$$\tilde{s} = -i\frac{s}{s_0}, \qquad s_0 = 1\ GeV^2.$$

The differential cross section has the form

$$\frac{d\sigma}{dt} = \frac{\pi}{s^2}|A(s,t)|^2 \tag{7}$$

Next, we will perform an overall (Pomeron) fit of all the above selected 5 sets of data by (4)-(7). We consider three variants of the combination of the contribution of the non-exponential behavior of $\varphi(t)$ and the nonlinear trajectory of the Pomeron $\alpha(t)$:

$$\beta \neq \gamma \neq 0 \quad (I), \qquad \beta \neq 0, \qquad \gamma = 0 \quad (II), \qquad \beta = 0, \qquad \gamma \neq 0 \quad (III).$$

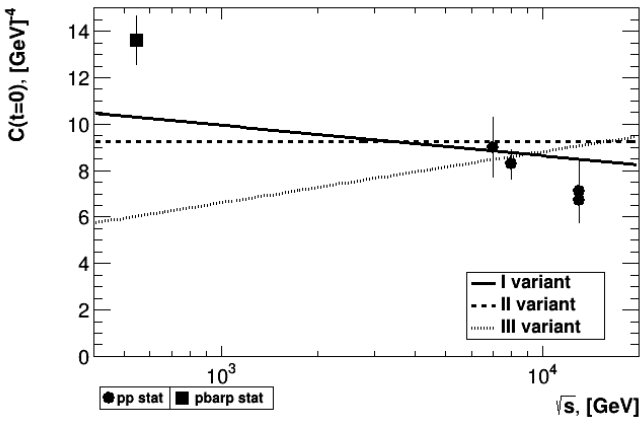


Figure 1. The curvature $C(s,0)$ calculated by (1)-(3) with the parameters obtained from the fit by (3) for all 5 selected sets of experimental data. Black circles: pp scattering, black squares: $\bar{p}p$ scattering. The bar represents the fitting uncertainty. The lines represent the calculated $C(s,0)$ by the (4)-(7).

Only the behavior of $C(s,0)$ in case (I) has a decreasing character, which completely corresponds to the behavior of the curvature determined directly from the experiment (black circles and squares). The absolute values of curvature parameter depending on s changes its sign at asymptotically large energies.

[1] T.G. Antchev et al. Nucl. Phys. B 899, 527 (2015).
[2] T.G. Antchev et al. Eur. Phys. J. C 79, 785 (2019).
[3] L. Jenkovszky, I. Szanyi, C.I. Tan, Eur. Phys. J. A 54, 116 (2018).

FIRST RESULTS OF ^{99m}Tc PRODUCTION IN ALL-UKRAINIAN CENTER FOR RADIOSURGERY

B.M.Bondar[1,2], B.Yu.Leshchenko[3], I.M.Kadenko[2], Ya.V.Kmetyuk[1]

[1]All-Ukrainian Center for Radiosurgery, Clinical Hospital «Feofaniya», Kyiv
[2]Department of Nuclear Physics, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv
[3]National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Kyiv
e-mail: borys.bondar@gmail.com

There are 64 medical radioisotope laboratories in Ukraine and 85% of all nuclear medicine examinations are being performed with ^{99m}Tc tracer [1, 2]. Despite a very high demand, there is no production center of ^{99m}Tc in Ukraine. The traditional way to produce technetium is the parent nuclide ^{99}Mo($T_{1/2}$=66 h) extraction from the fission products of ^{235}U(n,f)^{99}Mo reactions in nuclear reactors. An alternative way is cyclotron based technologies [3], which enable to produce ^{99m}Tc via proton induced reactions on Mo isotopes. This approach provides lower yield in comparison with the traditional one, but it has some advantages such as absence of contamination, low cost and decentralization.

Calculations and analysis in Ref. [4] showed that it is possible to get sufficient yield of ^{99m}Tc from enriched ^{100}Mo sample via ^{100}Mo(p,2n)^{99m}Tc nuclear reactions using two low-energy medical cyclotrons in Ukraine, which are both in Kyiv and operated only for ^{18}F production: 11-MeV Eclipse RD (Siemens) and 16-MeV PETtrace (GE) [5, 6]. Therefore, since 2018 the joint work between All-Ukrainian center for radiosurgery of the Clinical Hospital "Feofaniya" and Department of Nuclear Physics of the Taras Shevchenko National University of Kyiv is ongoing to study a cyclotron-based production of ^{99m}Tc.

Within the framework of cooperation, a new target assembly for solid samples irradiation in medical cyclotrons was designed, manufactured and tested under the proton beam [7]. For the sample preparation the powder of molybdenum with 92.2% enrichment by ^{100}Mo isotope was pressed into the solid pellet with size of Ø15 mm × 3 mm and then enclosed in the target assembly. The sample irradiation was realized in 11-MeV medical cyclotron Eclipse RD with the proton current of 6,3 μA during 280 seconds. The γ-spectrum of irradiated Mo sample was measured with application of NaI(Tl) and HPGe spectrometers. 13.1 MBq of ^{99m}Tc were produced, which is in good agreement with activity of 17.4 MBq, predicted in Ref. [4]. The difference can be caused by lower enrichment and lower energy of incident

protons. ^{95}Tc and ^{96}Tc were determined as the main impurities with total radioactivity of 0.038% of the produced ^{99m}Tc at the end of the Mo-target bombardment.

[1] O.V. Shcherbina, Ya.V. Kmetyuk, Radiological Herald, 4, 17 (2014).
[2] W.C. Eckelman, “Unparalleled Contribution of Technetium-99m to Medicine Over 5 Decades”, J. Am. Coll. Cardiol. Img. (2009).
[3] J. Beaver, H. J. Hupf, Nucl. Med. 12, 739 (1971).
[4] B.M. Bondar et al. Res.bull. Nat. Techn. Univ. of Ukraine “Kyiv Polytechnic Institute”, series Engineering, 6, 53 (2017).
[5] B.M. Bondar et al., Proc. of 2-d Int. Workshop “Medical physics – the current status, problems, the ways of development, innovation technologies”, Kyiv, Ukraine 70 (2012).
[6] B.M. Bondar et al., J. Kyiv Univ. News. Ser. Radiophysics and electronics 21, 16 (2014).
[7] B.M. Bondar et al., Problems of atomic science and technology 128, 93 (2020).

СВІЧЕННЯ ГЛІЦИНУ ПІД ДІЄЮ ЕЛЕКТРОНІВ

Й.Й.Брандіс, В.В.Кузьма, М.І.Шафраньош, А.М.Круцан,
А.-М.С.Колесніченко, М.І.Суховія, І.Є.Митропольський, І.І.Шафраньош

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: vasja_kuzma@ukr.net

Вплив різного роду чинників на біологічні молекули і супроводжуючі цей процес структурні зміни представляють собою важливу задачу в рамках фундаментальних проблем взаємодії, зокрема заряджених частинок з речовиною, і трансформації енергій в біологічних молекулах. Особливий інтерес являє вивчення міжмолекулярних взаємодій у водній та твердій фазах амінокислот в умовах опромінення електронами. Амінокислоти, як відомо, є основними будівельними блоками білків і безпосередньо беруть участь у донорно-акцепторних взаємодіях в поліпептидах. Гліцин (H_2N-CH_2-COOH) є відносно найпростішою амінокислотою і обов'язково наявний у складі з'єднувальних поліпентидів.

Метою роботи було дослідження за допомогою методу електрон-фотонної спектроскопії впливу опромінення пучком електронів на структуру і властивості гліцину у водній та твердій фазах. Для адаптації даного методу досліджень, молекули гліцину були іммобілізовані у поверхню твердої матриці (графіт). В якості розчинника використовувалася дистильована вода. Висадка певної кількості амінокислоти з водного розчину здійснювалася краплинним шляхом з подальшим просушуванням. Крім цього, були підготовлені зразки, які отримані шляхом додаткового безпосереднього втирання порошку гліцину в поверхню графіту.

Експерименти проводилися на універсальній надвисоковакуумній установці УСУ-4 (10^{-7} Па). Використовувалися пучки електронів з енергією 600 еВ і густиною струму j=1.4 мА/см^2. Емісія фотонів у області довжин хвиль λ=200-600 нм аналізувалася за допомогою світлосильного дифракційного монохроматора МДР-2, оптична вісь якого утворювала кут 45^0 з нормаллю до поверхні мішені. Кут падіння електронів відносно нормалі до зразка варіювався від 60 до 70^0. Детектування випромінювання проводилося фотоелектронним помножувачем типу ФЭУ-106.

На рисунку 1 показаний спектр люмінесценції молекул гліцину при опроміненні пучком електронів системи графіт+гліцин (з водного розчину). Для нього характерна широка смуга в області 270-500 нм. Прояв особливостей у спектрі випромінювання несе інформацію про енергетичну будову гліцину. Так можна виділити явно виражені головні піки з максимумами на довжинах хвиль

350 нм, 411 нм та 464 нм. Привертає увагу наявність піків при 337 нм та 359 нм, які можна ідентифікувати як випромінювання з продуктів фрагментації молекули гліцину N_2 ($C^4\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$) та CN ($^2\Sigma(\nu=1) \rightarrow {}^2\Sigma(\nu=0)$), відповідно [1]. Смугу з максимумом на 350 нм, яка бере початок з короткохвильового боку при 320 нм, спостерігали і в спектрі люмінесценції кристалічного гліцину (γ-модифікація) автори роботи [2].

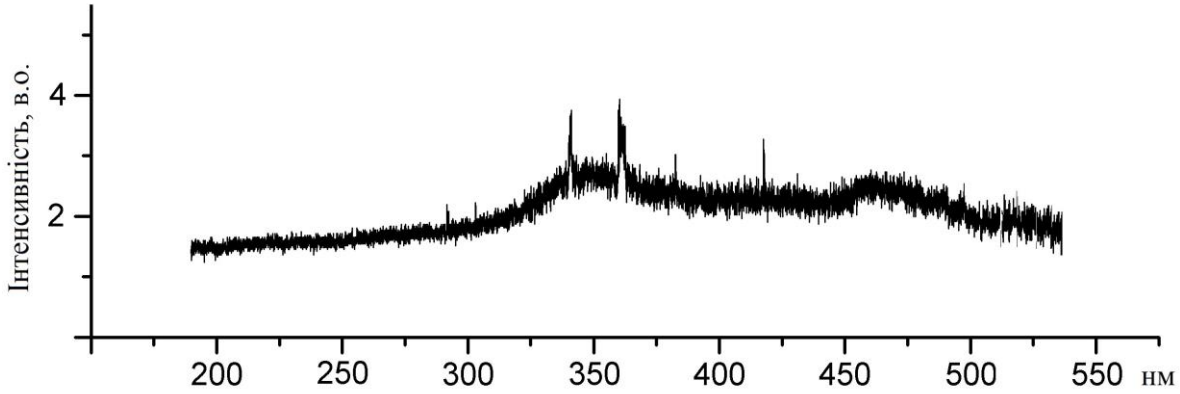


Рис. 1. Спектр люмінесценції молекул гліцину при опроміненні пучком електронів системи графіт+гліцин.

При опроміненні пучком електронів зразка з додатково нанесеним гліцином у виді порошку спостерігається утворення смуги з максимумом при 590 нм. Як відзначають автори [1], її появу можна пояснити утворенням збуджених молекул CO ($B^1\Sigma \rightarrow A^1\Pi$, $\lambda \sim 560–630$ нм) дисоціацією групи –COOH.

Проведені дослідження показали, що опромінення пучком електронів здатне впливати на характер міжмолекулярних взаємодій гліцину та викликати відчутні зміни в структурі та властивостях таких молекул.

[1] A.A. General, M.I. Migovich, V.A. Kelman, Yu.V. Zhmenyak, V.V. Zvenigorodsky, Journal of Applied Spectroscopy 82, 970 (2016).
[2] Ashok Kumar R., Ezhil Vizhi R.,Vijayan N., Rajan Babu D, Physica B. 406, 2594 (2011).

ЗБУДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ МОЛЕКУЛ ВАЛІНА В ГАЗОВІЙ ФАЗІ

А.І.Булгакова, М.М.Ердевді, Ю.А.Бандурин

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: alla.bulgakova.uzh@gmail.com

Валін належить до групи простих аліфатичних неполярних α-амінокислот, які мають найбільший алкільний бічний ланцюг Cα і існують у вигляді різних конформерів.

Іонізуюче випромінювання, взаємодіючи з живим організмом, може викликати різні зміни в генотипі внаслідок впливу на генетичні макромолекули ДНК і РНК. Застосування в дослідженнях моноенергетичних пучків електронів при збудженні складних молекул в газовій фазі дозволяє отримати інформацію про стан і структуру енергетичних рівнів, а також оцінити відносну ймовірність їх збудження. За сформованими уявленнями [1] саме з повільними електронами пов'язують основну частину деструктивних змін на молекулярному рівні біоструктур, причому головною мішенню є генетичні макромолекули [2].

Експеримент проводився з використанням паронаповненої комірки, в якій з ампули з незалежним нагріванням створювалася концентрація молекул валіна в області взаємодії з електронами порядку $6\cdot10^{11}$ cm^{-3}. Пучок електронів діаметром 2 mm, силою струму 10-100 μA в інтервалі енергій 0-70 eV детектувався циліндром Фарадея. Моноенергетичність електронного пучка (повна ширина на напіввисоті) була не гірше $\Delta E_{1/2}$=0.5 eV і визначалася автоматично перед кожним вимірюванням. Енергія електронів при вимірюваннях оптичних функцій збудження (ОФЗ) в заданому інтервалі енергій сканувалася автоматизованою системою вимірювань з кроком, який міг варіюватися в діапазоні 100-400 meV.

Випромінювання з камери зіткнень через кварцове вікно на бічній стінці вакуумної камери за допомогою лінзи фокусувалося на вхідну щілину монохроматора МДР-2 і детектувалося фотоелектронним помножувачем (ФЕП). Система автоматичного контролю параметрів і реєстрації корисного сигналу дозволяла працювати в режимі рахунку фотонів і надсилати електронні імпульси з ФЕП для обробки і запису на персональний комп'ютер. Оптичні спектри випромінювання в діапазоні довжин хвиль λ=200-520 nm вимірювалися з кроком 0.547 nm, час експозиції накопичення сигналу обирався в інтервалі 1-5 s в кожній точці, а вхідна щілина монохроматора шириною 1 mm забезпечувала спектральний розподіл Δλ=2 nm.

Оптичним методом нами проведено дослідження збудження молекул валіну в діапазоні енергій 0-70 eV. Процедура вимірювань включала в себе два етапи: на першому записувалися спектри випромінювання молекул валіну при фіксованих енергіях електронів 30, 50 і 70 eV в діапазоні довжин хвиль 270-440 nm, а на другому вимірювалися ОФЗ найбільш інтенсивних емісій як молекулярних смуг випромінювання, так і атомарних ліній. На рис. 1 показана ОФЗ, виміряна для довжини хвилі λ=284 nm (молекулярна смуга).

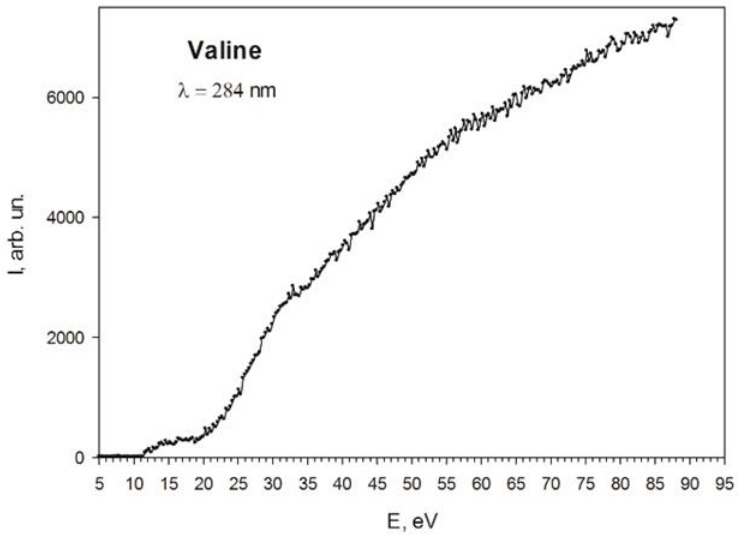


Рис. 1. ОФЗ спектральної лінії молекули валіна.

В результаті проведеної роботи зроблено висновки, що у випромінювання на довжині хвилі λ=284 nm, ймовірно, вносить вклад смуга 3-ї позитивної групи молекули CO, перехід $b^3\Sigma^+ - a^3\Pi$ (рівень 0-0 і λ= 284 nm).

Внаслідок електронного удару по молекулі валіну утворюються збуджені молекули OH* і CO*, які є фрагментами. Збільшення енергії бомбардуючих електронів з 30 до 70 eV призводить до перерозподілу частки кожного з цих фрагментів, що проявляється в неоднаковій зміні інтенсивності випромінювання. Для перевірки цього припущення ми провели вимірювання ОФЗ як для цих молекулярних смуг, так і для спектральної лінії атома водню H_β 486 nm. Енергетичні пороги для всіх видів емісій складають 10-11 eV (очевидно, це і є енергетичний поріг фрагментації молекули валіну), а збільшення квантового виходу з ростом енергії бомбардуючих електронів є індивідуальним для кожного з випромінювачів, що свідчить про інформативність подібних досліджень при фрагментації валіну.

[1] О.В. Смирнов, А.А. Басалаев, В.М. Бойцов и др., ЖТФ 84, 121 (2014).
[2] C. Sonntag, The chemical basis for radiation biology, London: Taylor & Francis press (1987).

МАС-СПЕКТРОМЕТРІЯ МОЛЕКУЛ ВАЛІНА ЕЛЕКТРОНАМИ В ГАЗОВІЙ ФАЗІ

А.І.Булгакова, А.М.Завілопуло

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: alla.bulgakova.uzh@gmail.com

Валін - аліфатична α-амінокислота, одна з восьми несинтезованих людським організмом амінокислот, необхідна для росту і синтезу тканин тіла, м'язової координації; азотного обміну; регулювання нервових процесів, стабілізації гормонального фону [1].

В експерименті в якості аналітичного приладу використовувався монопольний мас-спектрометр MX 7304A, який розміщувався у вакуумній установці з безмасляним відкачуванням, що забезпечувало тиск парів залишкових газів не гірше $2\cdot10^{-6}$ Torr в робочих умовах. Модернізоване джерело іонів працювало в режимі стабілізації електричного струму і дозволяло отримувати пучки електронів регульованої енергії від 5 до 80 eV, струм в межах 0.05-0.5 mA, при мінімальному розкиді по енергії $\Delta E½ = 200$ meV. Пучок молекул валіну формувався за допомогою багатоканального ефузійного джерела, концентрація досліджуваних молекул в області взаємодії з електронами була $10^{10}\div10^{11}$ cm^{-3}. Спеціальний пристрій зі зворотним зв'язком забезпечував високу температурну стабілізацію нагріву використовуваної речовини в інтервалі 300-600 K.

На рис. 1 показаний мас-спектр молекули валіна в діапазоні мас 0-120 Da, отриманий при температурі джерела молекул 393 K і енергії іонізуючих електронів Ue = 70 eV. Як видно з рис. 1 чітко виділяються чотири групи ліній, в яких найбільша інтенсивність належить іонам з m/z = 28, 42, 56 і 72 Da, відповідно.

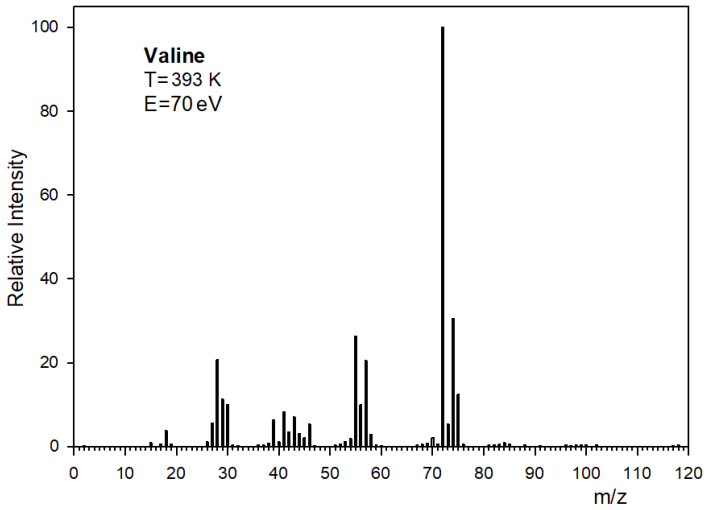


Рис. 1. Мас-спектр молекули валіну.

m/z=72 основний найінтенсивніший іон-фрагмент виникає в результаті ефективної дисоціації материнського іона молекули валіну при розриві С-С зв'язку з утворенням нейтрального фрагмента карбоксильної групи СООН відповідно до реакції:

$$C_5H_{11}NO_2 + e^- \rightarrow NH_2(CH3)_2(CH)^+ + (COOH) + 2e^- .$$

Температура досліджуваних молекул в газовій фазі є важливим чинником, що впливає на процеси взаємодії електронів з молекулами амінокислот, особливо на процес дисоціативної іонізації [2]. Нами виміряні температурні залежності виходу позитивних іонів-фрагментів молекули валіну. Як приклад на рис. 2 показані такі залежності для найбільш інтенсивних іонів-фрагментів $NH_2(CH3)_2(CH)^+$ (m/z=72), $NH_2CHCOOH^+$ (m/z=74), $NHCHC(OH)^+$ (m/z=57), $(CH_3)_2CH^+$ (m/z=43), $CH_2CCH_3^+$ (m/z=41) та CH_3 (m/z=15).

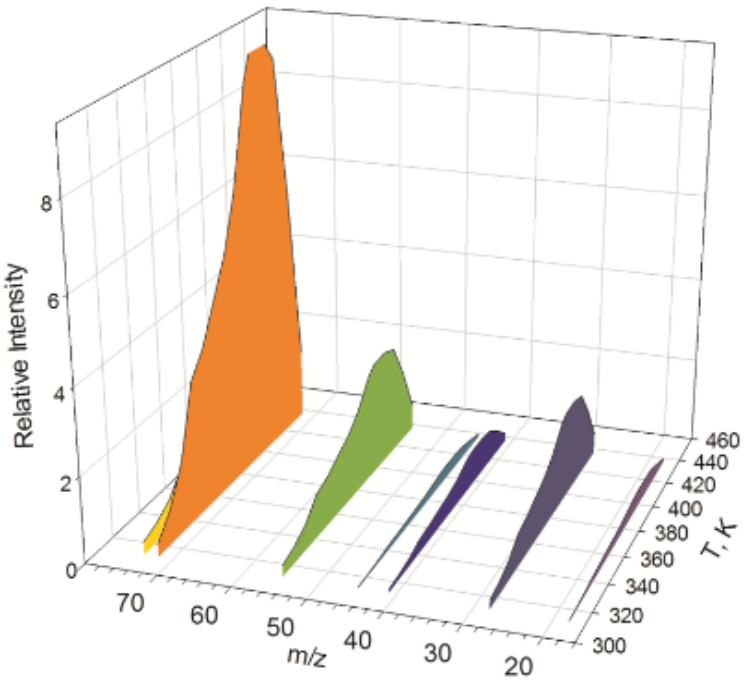


Рис. 2. Залежності утворення позитивних іонів-фрагментів молекули валіну від температури

Хід кривих температурних залежностей в загальному подібний. Спостерігаються три ділянки: на початковій ділянці інтенсивність має майже лінійне зростання, потім зростання близьке до експоненціального, потім насичення в області температур 400-418 К і далі - досить різкий спад, пов'язаний з початком розкладання досліджуваних речовин, а також їх фрагментів.

[1] J.F. Ward, Advances in Radiation Biology, New York:Academic Press, 181, 239 (1977).
[2] NIST Standard Reference Database. http:// www.webbook.nist.gov

ТЕРМОХРОМНІ НАНО- та МІКРОКОМПОЗИТИ НА ОСНОВІ КРИСТАЛІВ $(NH_2(C_2H_5)_2)_2CuCl_4$

Ю.Чорній, С.Семак, В.Капустяник

Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів
e-mail: ychornii@gmail.com

Метою наших досліджень є створення дешевого і технологічного термохромного матеріалу для термографії та оптичних накопичувачів інформації в комп'ютерах та інших гаджетах. Для практичних застосувань особливо актуальним є вивчення впливу різних типів полімерних матриць на властивості нано- і мікрокомпозитів на основі кристала $(NH_2(C_2H_5)_2)_2CuCl_4$ (DEACC). Структура цього монокристала сформована катіонами диетиламонію та метало-галогенними комплексами (МГК), з'єднаними водневими зв'язками. Високотемпературна фаза ($T > 311$ K) характеризується спотвореним тетраедричним оточенням іона міді, тоді як у низькотемпературній фазі співіснують тетраедричне та плоске квадратне оточення [1, 2].

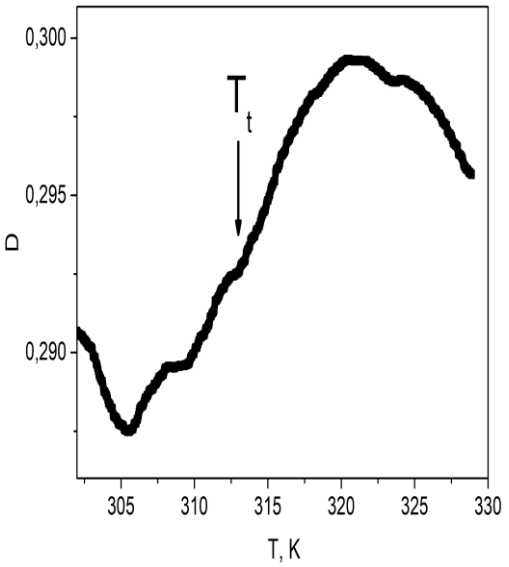


Рис. 1. Температурна залежність оптичної густини нанокомпозита DEACC (5%)-ПК на фіксованій довжині хвилі λ = 406 нм.

Досліджено температурну еволюцію смуг перенесення заряду (ПЗ) нанокристалів (НК) розміром 160 нм в полікарбонатній (ПК) матриці. Температурна залежність оптичної густини при λ=406 нм (24 630 см$^{-1}$), що відповідає максимуму смуги ПЗ в нанокомпозиті DEACC (5%) – ПК, виявляє помітну, але неперервну зміну в околі T = 313 K (Рис. 1), яку можна вважати термохромним ефектом [3]. З іншого боку, не виявлено помітного гістерезису цієї залежності, характерного для термохромних фазових переходів (ФП) I роду. Отже, композит з НК розміром порядку 160 нм зазнає термохромного ФП II роду.

Беручи до уваги, що виявлена смуга ПЗ відповідає електронному переходу на рівні Cu $3d_{x^2-y}$, неперервний ФП у нанокомпозиті не впливає суттєво на координацію іонів Cu^{2+}. Низькотемпературна та високотемпературна фази характеризуються лише тетраедричними мідно-галогенними комплексами. Плоскі квадратні комплекси, характерні для низькотемпературної фази в об'ємних монокристалах, зникають в НК через розмірний ефект, пов'язаний з поверхневими явищами.

На рис. 2 для порівняння наведені температурні залежності оптичної густини мікрокомпозитів з латексною та полістирольною (ПС) матрицями,

отримані при сталій довжині хвилі світла, та відповідні залежності для об'ємного кристала. Останній характеризується петлею гістерезису прямокутної форми, яка відображає гістерезис температури фазового переходу.

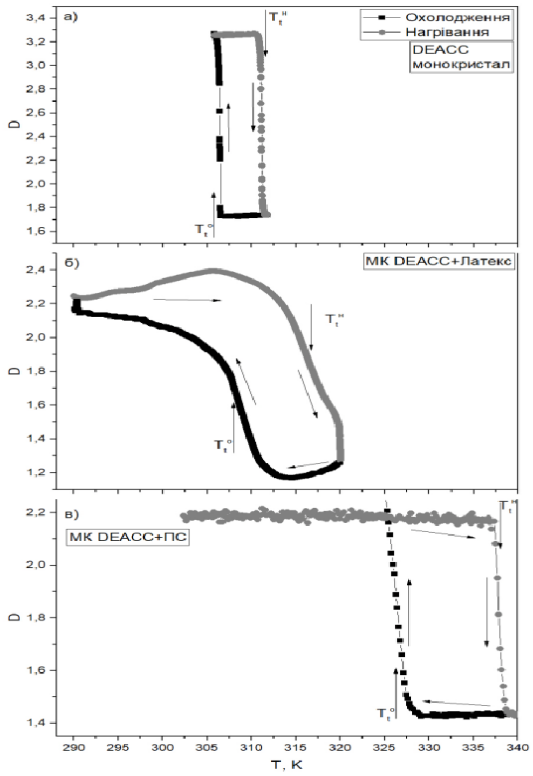


Рис. 2. Температурні залежності оптичної густини об'ємного кристала DEACC (а) та МК DEACC в латексі (б) при = 633 нм (15 800 см$^{-1}$) та в матриці ПС (в) при = 590 нм (16 949 см$^{-1}$)

Композити на основі МК DEACC з латексною матрицею зазнають чіткого, але трохи розмитого термохромного ФП I роду в околі 316 К (при нагріванні), що супроводжується істотною зміною кольору зразка від насиченого зеленого до блідо-жовтого [3]. Виявлене зміщення температури ФП в МК порівняно з об'ємним кристалом, а також спотворена форма петлі гістерезису пояснюється впливом як полімерної матриці, так і поверхневих явищ, які все ще важливі в мікрокомпозиті.

Мікрокомпозити з полістирольною матрицею також характеризуються петлею гістерезису, дуже подібною до тієї, що спостерігається в об'ємному кристалі DEACC (Рис. 2). Мікрокристали зазнають термохромного ФП I роду при 337 К (при нагріванні), який теж супроводжується різкою зміною кольору зразка від насиченого зеленого до блідо-жовтого.

Зміщення температури ФП пов'язане з впливом полістирольної матриці. Чітка петля гістерезису, що спостерігається у цьому випадку, виглядає найбільш привабливою для практичного застосування цього мікрокомпозита. Виявлено помітний вплив полімера на фізико-хімічні властивості кристала. В композиті на основі полістиролу зміщення температури ФП проявляється набагато істотніше, ніж у мікрокомпозитах на основі латексу [3]. Оскільки полістирол є більш «жорстким» полімером, він суттєво впливає на аніонну геометрію кристалів завдяки п’єзохромному ефекту, що призводить до більш істотного зміщення температури термохромного фазового переходу.

[1] D. R. Bloomquist, M. R. Pressprich, R. D. Willett, J. Am. Chem. Soc. 110, 7391 (1988).
[2] V. B. Kapustyanyk, Yu. M. Korchak, J. Appl. Spectrosc. 67, 1045 (2000).
[3] V. Kapustianyk, Yu. Chornii, S. Semak, J. Phys. Stud. 24, 4707 (2020).

ТЕМПЕРАТУРНА ЕВОЛЮЦІЯ АБСОРБЦІЙНИХ СПЕКТРІВ СЕГНЕТОЕЛАСТОЕЛЕКТРИКА ТЕТРАХЛОРКУПРАТУ АМОНІЮ ДИГІДРАТУ

Ю.Чорній, В.Капустяник, С.Семак, М.Рудко, А.Васьків

Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів
e-mail: svitlana.semak@lnu.edu.ua

Пошук нових кристалічних фероїків є актуальним завданням сьогодення, оскільки такі матеріали широко застосовують у пристроях функціональної електроніки, зокрема у різноманітних сенсорах, модуляторах, перетворювачах тощо. Особливо цікавими для науковців є фероїки другого порядку, до яких відносять сегнетоеластоелектрики, та магнітні мультифероїки, у яких співіснують різні типи впорядкування – магнітне і сегнетоелектричне.

Кристал тетрахлоркупрату амонію дигідрату ($(NH_4)_2CuCl_4 \cdot 2H_2O$) володіє феромагнітною фазою, при температурі, нижчій за 0,7 К [1], і сегнетоеластоелектричною (СЕЕ) фазою, що лежить нижче від температури $T_c = 200$ К [1, 2]. У СЕЕ фазі ($T < T_c$) макроскопічним параметром порядку є компонента тензора третього рангу, який описує п'єзоелектричний ефект. Сегнетоеластоелектричні домени відрізняються знаком цієї компоненти, а також компоненти тензора оптичної активності. Це означає, що різні орієнтаційні стани доменів можна перемикати одночасним прикладанням механічного напруження та електричного поля у відповідних напрямах [1].

Кристал $(NH_4)_2CuCl_4 \cdot 2H_2O$ при кімнатній температурі належить до просторової групи $P4_2/mnm$. Фазовий перехід другого роду при T_c супроводжується зміною точкової симетрії $4/mmm \rightarrow \bar{4}2m$ та спричинений впорядкуванням тетраедрів NH_4^+ і деформацією октаедрів $[CuCl_4 \cdot 2H_2O]$ [2]. Відомо, що абсорбційна спектроскопія є чудовим методом дослідження структурних змін, пов’язаних з деформацією хромофорних груп, в ролі яких виступають метал-галогенні комплекси.

У цій роботі проведено детальний аналіз температурної еволюції спектрів поглинання фероїка $(NH_4)_2CuCl_4 \cdot 2H_2O$, що відповідають електронним переходам між рівнями іона Cu^{2+} у температурному діапазоні від 15 до 290 К для двох незалежних напрямів поляризації світла (Рис. 1). Значний плеохроїзм спектрів і різне число смуг, що відповідають різним напрямам поляризації світла, свідчить про істотну анізотропію метал-галогенного комплексу (Рис. 1). Аналіз вказаних внутрішньоіонних переходів між рівнями, що зазнають розщеплення під впливом кристалічного поля лігандів, свідчить про те, що октаедричний комплекс $[CuCl_4 \cdot 2H_2O]$ є ромбічно здеформованим, причому з пониженням температури нижче від T_c ступінь деформації зростає. Ця зміна проявляється у більш істотному розщепленні відповідних смуг у СЕЕ фазі.

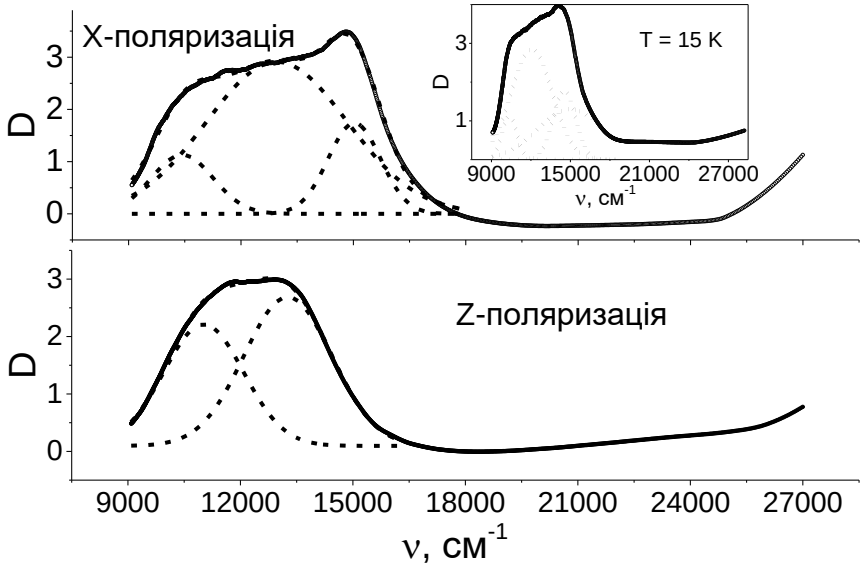


Рис. 1. Спектр поглинання кристала $(NH_4)_2CuCl_4 \cdot 2H_2O$, отриманий при кімнатній температурі при різній поляризації світла; на вставці спектр поглинання при T = 15 К

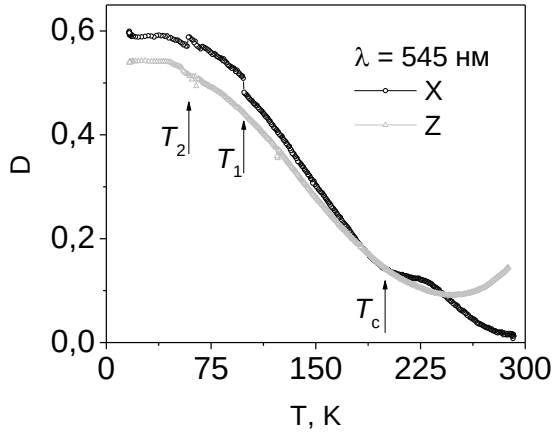


Рис. 2. Температурні залежності оптичної густини кристала $(NH_4)_2CuCl_4 \cdot 2H_2O$ на фіксованій довжині хвилі, отримані в режимі охолодження.

Сегнетоеластоелектричний фазовий перехід II роду при T_c = 200 К проявляється у вигляді зміни нахилу на температурних залежностях оптичної густини на фіксованій довжині хвилі (див. Рис. 2), а низькотемпературні аномалії при T_1 = 98 К і T_2 = 60 К можуть вказувати на раніше невідомі фазові переходи, ймовірно, I роду.

Робота виконана завдяки фінансовій підтримці Національного фонду досліджень України в рамках проєкту «Багатофункціональні органічно-неорганічні магнітоелектричні, фотовольтаїчні і сцинтиляційні матеріали» (Реєстр. № 2020.02/0130).

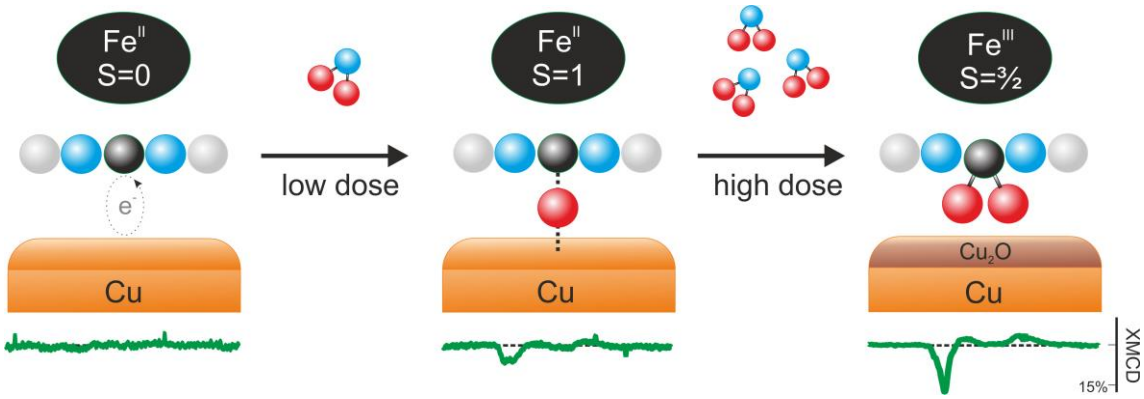
[1] Z. Tylczynski, M. Wiesner, Materials Chemistry and Physics 149-150, 566-573 (2015).
[2] H. Suga, M. Sorai, T. Yamanaka, S. Seki, Bull. Chem. Soc. Jpn. 38, 1007-1015 (1965).

FERROUS TO FERRIC TRANSITION IN Fe-PHTHALOCYANINE DRIVEN BY NO_2 EXPOSURE

I.Cojocariu[1], S.Carlotto[2], H.M.Sturmeit[3], G.Zamborlini[3], M.Cinchetti[3], A.Cossaro[4], A.Verdini[4], L.Floreano[4], M.Jugovac[1], P.Puschnig[5], C.Piamonteze[6], M.Casarin[2], V.Feyer[1], C.M.Schneider[1]

[1]Peter Grünberg Institute (PGI-6), Forschungszentrum Jülich GmbH, Jülich, Germany
[2] Dipartimento di Scienze Chimiche, Università degli Studi di Padova, Padova, Italy
[3] Technische Universität Dortmund, Experimentelle Physik VI, Dortmund, Germany
[4] CNR-IOM, Lab. TASC, Trieste, Italy
[5] Institute of Physics, University of Graz, NAWI Graz, Graz, Austria
[6] Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, Villigen PSI, Switzerland
e-mail: i.cojocariu@fz-juelich.de

Due to its unique magnetic properties offered by the open-shell electronic structure of the central metal ion, and for being an effective catalyst in a wide variety of reactions, iron phthalocyanine has drawn significant interest from the scientific community. Nevertheless, upon surface deposition, the magnetic properties of the molecular layer can be significantly affected by the coupling occurring at the interface, and the more reactive the surface, the stronger is the impact on the spin state. Here, we show that on Cu(100), indeed, the strong hybridization between the Fe d-states of FePc and the sp-band of the copper substrate modifies the charge distribution in the molecule, significantly influencing the magnetic properties of the iron ion. The Fe^{II} ion is stabilized in the low singlet spin state (S=0), leading to the complete quenching of the molecule magnetic moment. By exploiting the FePc/Cu(100) interface, we demonstrate that NO_2 dissociation can be used to gradually change the magnetic properties of the iron ion, by trimming the gas dosage. For lower doses, the FePc film is decoupled from the copper substrate, restoring the gas phase triplet spin state (S=1). A higher dose induces the transition from ferrous to ferric phthalocyanine, in its intermediate spin state, with enhanced magnetic moment due to the interaction with the atomic ligands. Remarkably, in this way, three different spin configurations have been observed within the same metalorganic/metal interface by exposing it to different doses of NO_2 at room temperature.



Scheme 1. Schematic representation of the systems leading to the stabilization of three different spin configurations of the Fe center. Left: at the FePc/Cu(100) interface the Fe^{II} is stabilized in the singlet spin state due to the charge transfer from the copper substrate; middle: at low dose, the atomic oxygen generated from the NO_2 dissociation at the interface partially decouples the molecule from the substrate stabilizing the Fe^{II} in the triplet spin state; right: after high NO_2 dose the iron undergoes the ferrous to ferric transition due to the coordination of two oxygen atoms in *cis* position. Both at low and high NO_2 doses the surface is involved in the oxidation process.

[1] I. Cojocariu, S. Carlotto, H. M. Sturmeit, G. Zamborlini, M. Cinchetti, A. Cossaro, A. Verdini, L. Floreano, M. Jugovac, P. Puschnig, C. Piamonteze, M. Casarin, V. Feyer, C. M. Schneider, Chem. Eur. J. 27, 3526 (**2021**).

ПРО ПОЗДОВЖНІ ЕЛЕКТРОМАГНІТНІ ХВИЛІ У ХВИЛЕВОДАХ, ПЛАЗМОНАХ, АНТЕНАХ І ЛАЗЕРНИХ ПУЧКАХ, ЩО ПЕРЕТИНАЮТЬСЯ

М.А.Гат'ян[1], В.М.Симулик[2], Т.М.Заяць[1]

[1]ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
[2]Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: hatian.mykhailo@student.uzhnu.edu.ua

З часів старту ужгородських вчених у цих дослідженнях [1, 2], які були замовлені Н.П. Хворостенко [3, 4], інтерес до даної проблематики надзвичайно виріс [5–19]. Сьогодні не має необхідності обов’язково пропонувати експерименти, адже велика і цілком достатня кількість дослідів вже поставлена [5, 8, 11, 13–16] і чекає на додаткові пояснення та теоретичні моделі.

Хвилеводи. Електромагнітне поле у хвилеводах не є чисто поперечним. Саме на основі хвилеводів запатентований «Пристрій для випромінювання поздовжньо-скалярних електромагнітних хвиль RU 2287212 C1» [5]. Відмічаємо наявність поздовжньої компоненти також і у вектора магнітного поля (див. [6] як доповнення). Нижче твердження про поздовжню компоненту робиться лише для вектора електричного поля (і для супутньої скалярної хвилі).

Плазмони. Автори теоретичної роботи [7] вивчали задачу про плазмони у вакуумі квантової електродинаміки (КЕД). Показано, що бозонізована версія (1+1)-вимірної КЕД допускає існування класичних стійких, періодичних у часі розв’язків, тобто стоячих хвиль поздовжнього електричного поля і густини поляризації вакууму. Наявність поздовжніх електромагнітних хвиль у плазмі обговорюється вже понад 50 років.

Антени. У [8] описано експериментальну реєстрацію кульовою антеною скалярної хвилі потенціалу, разом із поздовжньою електричною хвилею, у напрямку розповсюдження. Тим не менше, автори [9–11] висловлюють сумніви щодо цього результату як з теоретичної [9, 10], так і з експериментальної точки зору [11]. Авторам [11] не вдалося повторити результат [8], а у роботі [10] доведено, що експериментатори [8] реєстрували класичні ТЕМ хвилі, випромінені струмами, що текли по Землі, і були спричинені кульовою антеною, яка використовувалась у досліді. У теоретичній роботі [12] досліджено випромінювання електромагнітних полів густиною електричного заряду, яка розподілена рівномірно на поверхні провідної сфери. Результуюче електромагнітне поле має як поперечні, так і поздовжні компоненти. Ротор магнітного поля дає лише поперечні компоненти електричного поля, які залежать від 1/r. Поздовжнє електричне поле залежить просторово від 1/r і не взаємодіє з поперечним магнітним полем, оскільки воно не має ротора.

Лазерні пучки, що перетинаються. Генерація радіально поляризованих променів на основі інтерферометрії спостерігалась у [13]. Досліджено, що, будучи сфокусованим, радіально поляризований промінь має чисте поздовжнє поле, корисне для прискорення частинок і цілком можливо, що має інші

унікальні застосування. Продемонстровано дві різні методики, які базуються на інтерферометрії, перетворенні лінійно поляризованого світла в радіальну поляризацію. У роботі [14] вивчалось чітке фокусування для радіально поляризованого променя світла. Показано, що радіально поляризоване поле може бути сфокусовано до розміру плями, значно меншої, ніж для лінійної поляризації. При сильному фокусуванні радіально поляризоване поле призводить до поздовжньої компоненти електричного поля у фокусі, який є чітким і відцентрованим на оптичній осі. Нещодавно в [15] був представлений простий експериментальний метод генерації інтенсивного поздовжнього електричного поля з поперечних електромагнітних хвиль (лазерних імпульсів), які мають радіально-симетричну поляризацію. Генероване лазером поздовжнє електричне поле спостерігалось у двох вимірах і відрізнялось від поперечної складової за допомогою методу оптичного ефекту Керра. Експериментальні та теоретичні дослідження в роботі [16] доводять, що поздовжня компонента поля має максимальну амплітуду, коли “звичайна” компонента поля дорівнює нулю. Застосовувався потужний промисловий CO_2 лазер. У [17] розраховано поля та характеристики поширення у вакуумі надкороткого щільно сфокусованого радіально поляризованого лазерного імпульсу. У [18] за допомогою методу векторної дифракції показано, що для поздовжнього поля максимум у $2{,}2\times10^{13}$ В/см досягається на основі радіально поляризованого 11,2-фс, 11,2-Дж рівномірного у профілі лазерного імпульсу.

Відмітимо особливо наявність в Ужгороді як різноманітних лазерів, так і першого теоретичного опису [2, 19] поздовжніх електро-скалярних хвиль у рамках звичайної класичної електродинаміки Максвела.

[1] В.М. Симулик, ТМФ 87, 76 (1991).
[2] I.Yu. Krivsky, V.M. Simulik, Uzhg. Univ. Sci. Herald: Ser. Phys. 2, 121 (1998).
[3] Н.П. Хворостенко, Изв. ВУЗов: Сер. Физ. 3, 24 (1992).
[4] Н.П. Хворостенко, НИР «Эфир», М.: ВНТИЦ № ГР 01910008626 (1990).
[5] Ю.Н. Кузнецов, Патент Російської Федерації, RU 2287212 C1 (2006).
[6] J.B. Driscoll *at al*, Optics Express 17, 2797 (2009).
[7] E.Yu. Petrov, A.V. Kudrin, Phys. Rev. A 94, 032107 (2016).
[8] C. Monstein, J.P. Wesley, Europhys. Lett. 59, 514 (2002).
[9] R. Bray, M.C. Britton, Europhys. Lett. 66, 153 (2004).
[10] K. Rebilas, Europhys. Lett. 83, 60007 (2008).
[11] E.J. Butterworth *at al.*, J. Sci. Explor. 27, 13 (2013).
[12] Y.Z. Umul, Optik 166. 236 (2018).
[13] S.C. Tidwell, D.H. Ford, W.D. Kimura, Appl. Opt. 29, 2234 (1990).
[14] R. Dorn, S. Quabis, G. Leuchs, Phys. Rev. Lett. 91, 233901 (2003).
[15] G. Miyaji *at al.*, Appl. Phys. Lett. 84, 3855 (2004).
[16] V.G. Niziev, V.P. Yakunin, N.G. Turkin, Quantum Electronics 39, 505 (2009).
[17] Y.I. Salamin, Phys. Rev. A 92, 053836 (2015).
[18] T.M. Jeong, S. Bulanov, S. Weber, G. Korn, Optics Express 26, 33091 (2018).
[19] V.M. Simulik, arXiv: 1606.01738v2, [physics. class-ph], 23 p. (2020).

COLLISIONAL EXCITATION OF NH_3 BY MOLECULAR HYDROGEN: CLOSE-COUPLING CALCULATIONS FOR HIGHER KINETIC TEMPERATURES

S. Demes and F. Lique

Institut de physique de Rennes (IPR), Université de Rennes, Rennes, France
e-mail: sandor.demes@univ-rennes1.fr

Ammonia (NH_3) is the first polyatomic molecule, which was detected in the interstellar medium (ISM) [1]. It has been widely used as a probe of physical conditions in interstellar environments, like pre-stellar cores, molecular clouds, external galaxies [2]. Due to the inversion motion of the symmetric top NH_3, its rotational energy levels are split into two sublevels, denoted by index $\varepsilon = \pm 1$. The intensity of the inversion lines of NH_3 thus could be used in a role of a "thermometer" to probe the temperature of the gas in the ISM [3]. The calibration of such "ammonia thermometer" depends on the accuracy of the collisional rate coefficients [4].

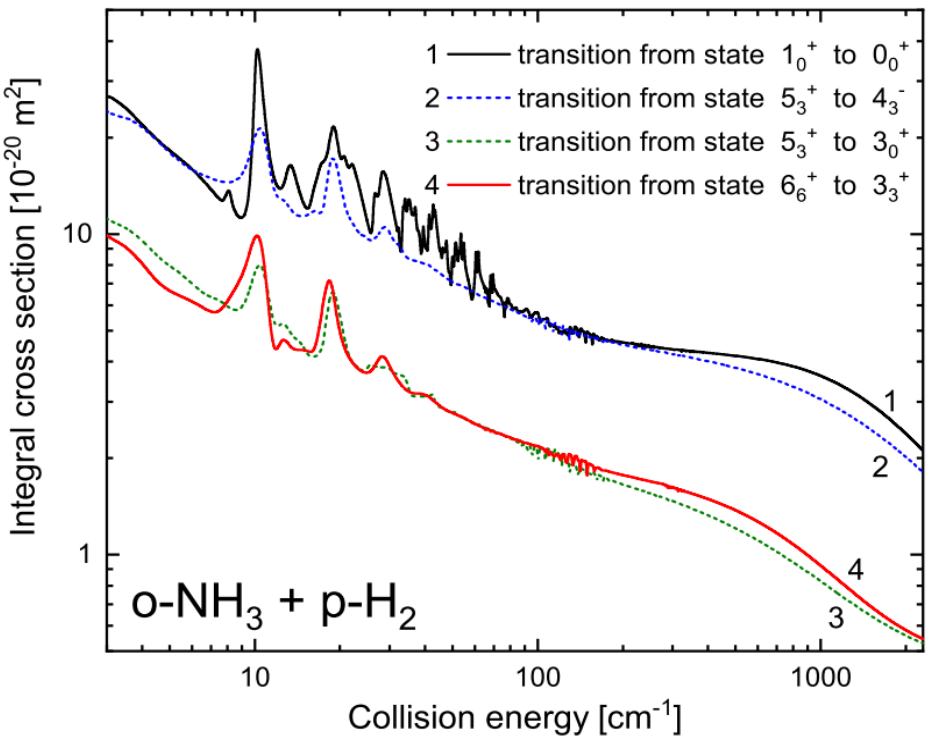


Fig. 1. State-to-state cross sections for rotational de-excitation of *ortho*-NH_3 by *para*-H_2.

We have calculated state-to-state rotational de-excitation cross sections (CSs) and collisional rate coefficients (RCs) of *ortho*(*o*)- and *para*(*p*)-NH_3 in collision with *o*-H_2 and *p*-H_2. The CSs were calculated up to 2600 cm^{-1} collision energies by the close-coupling method, using the HIBRIDON scattering code. We used an interaction potential (PES) for the collision system, as it is proposed by Maret *et al.* [3]. The

calculated cross sections depending on collision energy are shown in Fig. 1 for some selected transitions in *o*-NH_3 + *p*-H_2 collision. The initial and final states of the transitions are denoted by j_k^{ε}, where *j* is the total angular momentum of NH_3, *k* is its projection on the C_3 rotational axis, and $\varepsilon = \pm$ is the symmetry index [4]. The state-to-state rate coefficients were calculated in the 0 – 500 K temperature range by integrating the cross sections over a Maxwell-Boltzmann distribution of relative velocities. Worth noting here that Bouhafs *et al*. [4] calculated the CSs up to 1600 cm^{-1} total energies and the RCs up to 200 K temperatures for the $NH_3 + H_2$ collision system using similar numerical techniques, however there is a high demand on reliable collisional data at higher kinetic temperatures as well.

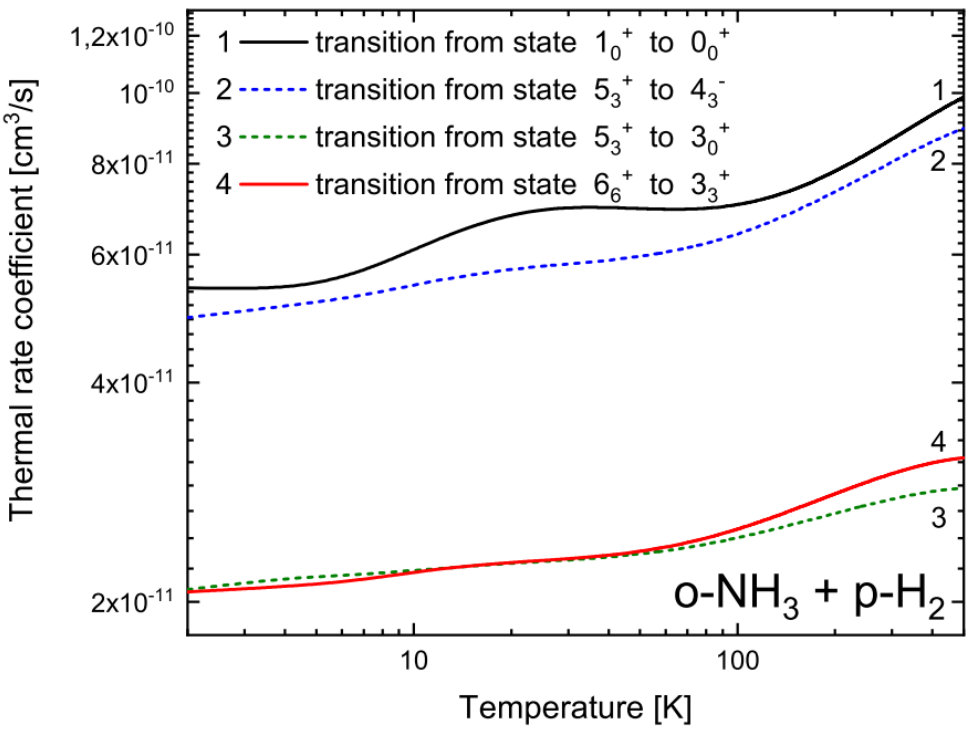


Fig. 2. Thermal rate coefficients for rotational de-excitation of *ortho*-NH_3 by *para*-H_2.

Our rate coefficients are presented in Fig. 2. for the same transitions, as indicated in Fig. 1. The RCs are plotted as a function of the kinetic temperature. Further results are to be presented in the conference.

[1] A.C. Cheung, D.M. Rank, C.H. Townes *et al.*, PRL 21, 1701 (1968).
[2] P.T. Ho, C.H. Townes, ARA&A 21, 239 (1983).
[3] S. Maret, A. Faure, E. Scifoni, L. Wiesenfeld, MNRAS 399, 425 (2009).
[4] N. Bouhafs, C. Rist, F. Daniel, F. Dumouchel, F. Lique, L. Wiesenfeld, A. Faure, MNRAS 470, 2204 (2017).

СТРУКТУРНІ, ЕЛЕКТРОННІ ТА ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ $CH_3NH_3PbBr_3$: РОЗРАХУНОК З ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ

М.Коваленко, О.Бовгира, О.Козаченко

Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів
e-mail: mariya.kovalenko@lnu.edu.ua

Органічно-неорганічні галогенідні перовскіти (perovskite) на сьогоднішній день одні з найперспективніших матеріалів для створення ефективних, недорогих, тонкоплівкових оптоелектронних пристроїв [1]. Ці матеріали мають властивості, важливі як з теоретичного, так і з експериментального погляду. Важливим аспектом дослідження таких перовскітних матеріалів є розуміння їхньої електронної структури, що, у свою чергу, стане важливим кроком до розширення можливостей застосування таких матеріалів. Якісно точне зображення електронної структури досліджуваних перовскітів може дати додаткові знання про транспортні властивості таких матеріалів.

Серед великого розмаїття органічно-неорганічних гібридних перовскітів, сполуки на основі броміду свинцю є цікавими та відомими напівпровідниками з прямими енергетичними щілинами. Модельним об’єктом для цього дослідження стала сполука $CH_3NH_3PbBr_3$, яка демонструє температуро-залежні фазові перетворення. В цьому дослідженні проведено аналіз та порівняння структурних параметрів, електронної структури та оптичних властивостей перовскіту $CH_3NH_3PbBr_3$ з використанням найбільш доступних методів теорії функціоналу густини (DFT). Крім того, ми представляємо комплексний огляд для кубічної, орторомбічної та тетрагональної кристалічних фаз $CH_3NH_3PbBr_3$ в порівнянні з експериментально отриманими значеннями.

Відомо, що точність розрахунків у рамках DFT сильно залежить від обмінно-кореляційного потенціалу, який використовується в розрахунках. Встановлено, що найкраще узгодження між теоретичними та експериментальними параметрами ґратки отримуємо при використанні наближень GGA-PBEsol та GGA-PBEsol+U. Розрахунки електронної структури показали, що всі кристалічні фази $CH_3NH_3PbBr_3$ володіють напівпровідниковими властивостями з прямими забороненими зонами. Аналіз оптичних властивостей трьох кристалічних фаз досліджуваного перовскіту вказує на широкий температурний діапазон використання цієї сполуки.

Робота виконана в межах проєкту 2020.02/0130 “Багатофункціональні органічно-неорганічні магнітоелектричні, фотовольтаїчні і сцинтиляційні матеріали” (реєстр № 0120U104913) за рахунок ґрантової підтримки Національного фонду досліджень України.

[1] G. Zhang, G. Liu, L. Wang, J.T.S. Chem. Soc. Rev. 45, 5951 (2016).

АТОМНА СИСТЕМА ВАНАДІЮ: РОЗРАХУНОК СТРУКТУРИ

А.А.Кочемба, В.Ю.Лазур

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: alicekochemba2005@gmail.com

Ванадій належить до елементів, що мають широке застосування у медицині, фотографії, виробництві ванадієвої сталі і наукових дослідженнях. Ванадій застосовують як конструкційний матеріал в ядерних реакторах, а сплави на основі титану з добавками ванадію — в авіаційній і ракетній техніці. Проте експериментальне дослідження атомної системи ванадію є дуже складним, і практично єдиним джерелом даних щодо характеристик $e^- + V$ та $h\nu + V^-$ -розсіяння є теоретичні розрахунки. Практична важливість подібних обчислень, окрім власне вивчення сучасних методів розрахунку атомної структури, визначається необхідністю подальшого застосування отриманих CSF-базисів для обчислення характеристик електрон-атомного розсіяння. Набори атомних констант, одержані у процесі розрахунків структури атома ванадію, є важливою передумовою для подальшого отримання характеристик розсіяння $e^- + V$. Значення останніх повинні розглядатися в загальному контексті, тобто як для прояснення фундаментальних аспектів проблеми зіткнення електронів з атомами, так і їх реалізації у прикладних задачах фізики плазми, астрофізики, задачі керованого термоядерного синтезу, побудови лазерних пристроїв.

Атом ванадію належить до елементів VB групи Періодичної системи, поряд з атомами ніобію, танталу, дубнію. Заряд ядра − 23. Електронна конфігурація основного стану має вигляд: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2\ {}^4F$.

Спектр ванадію, згідно даних NIST [1], є складним. Нижньому рівню відповідають чотири різні терми тонкої структури (${}^4F_{3/2}$, ${}^4F_{5/2}$, ${}^4F_{7/2}$,${}^4F_{9/2}$) конфігурації основного стану $3d^3 4s^2$ з енергіями, відповідно, 0.0, 0.017, 0.04, 0.069 еВ. Значення енергії основного стану в *LS*-наближенні має бути отримано за рахунок вагового усереднення рівнів тонкої структури квартету $3d^3 4s^2\ {}^4F_{3/2,5/2,7/2,9/2}$ при переході від *LSJ*-представлення NIST [1] до використовуваного нами наближення *LS*-зв'язку. Постійно відкрита внутрішня 3*d*-оболонка при закритій/відкритій зовнішній 4*s*-оболонці призводить до появи дуже великого розмаїття як проміжних, так і повних *LS*-термів. Так, конфігурація основного стану $3d^3 4s^2$ може мати проміжні (і, відповідно, повні) терми ${}^4F$, ${}^4P$, ${}^2G$, ${}^2P$, ${}^2D$, ${}^2H$ – з порядковими номерами *LS*-станів 1, 4, 5, 6, 7, 10, відповідно. Інші збуджені рівні спектру ванадію утворені переважно шляхом збурення одного 4*s*-електрона з валентної оболонки $4s^2$ на якийсь із спектроскопічних рівнів конфігурацій $3d^4({}^5D, {}^3H, {}^3P, {}^3F, {}^3D, {}^3G, {}^1G, {}^1I, {}^1D)4s, nl$ (n = 3, 4, 5, 6, 7, l = 0, 1, 2, 3, 4), $3d^3\,({}^4F)4s4p({}^3P)$, $3d^5$ та $3d^4({}^5D)4p$. Для прикладу, проблемним для розрахунку є 14-й, 15-й та 19-й *LS*-рівні, $3d^3({}^4F)4s4p({}^3P^\circ)\ {}^6D^\circ, {}^6F^\circ$, $3d^5\ {}^6S$. Все це вимагає внесення значних коректив у порядок розрахунку конфігураційних станів атома ванадію. Наявність у нижній частині спектру

станів з розмороженими 3*d*- та 4*s*-оболонками вказує на недостатність урахування в розрахунках тільки *валентної кореляції*, без одночасного врахування кор-валентної. Відносно невеликий заряд ядра і відсутність сильного розщеплення якогось з рівнів на *LSJ*-підрівні, свідчить про відносно *малу роль релятивістських ефектів* у розрахунку нижчих 20-25 енергетичних рівнів.

На рисунку 1 наведено енергії збудження E_{exit} спектроскопічних станів, отриманих нами у одно- (HF) і багатоконфігураційному (MCHF) розрахунках. Їх значення порівнюються з експериментальними даними NIST [1]. В загальному точність розрахунків спектру енергій для атома ванадію складає 0.02–0.8 еВ, що є зовсім непогано, враховуючи об'єктивну складність досліджуваної атомної системи − нейтрального ванадію.

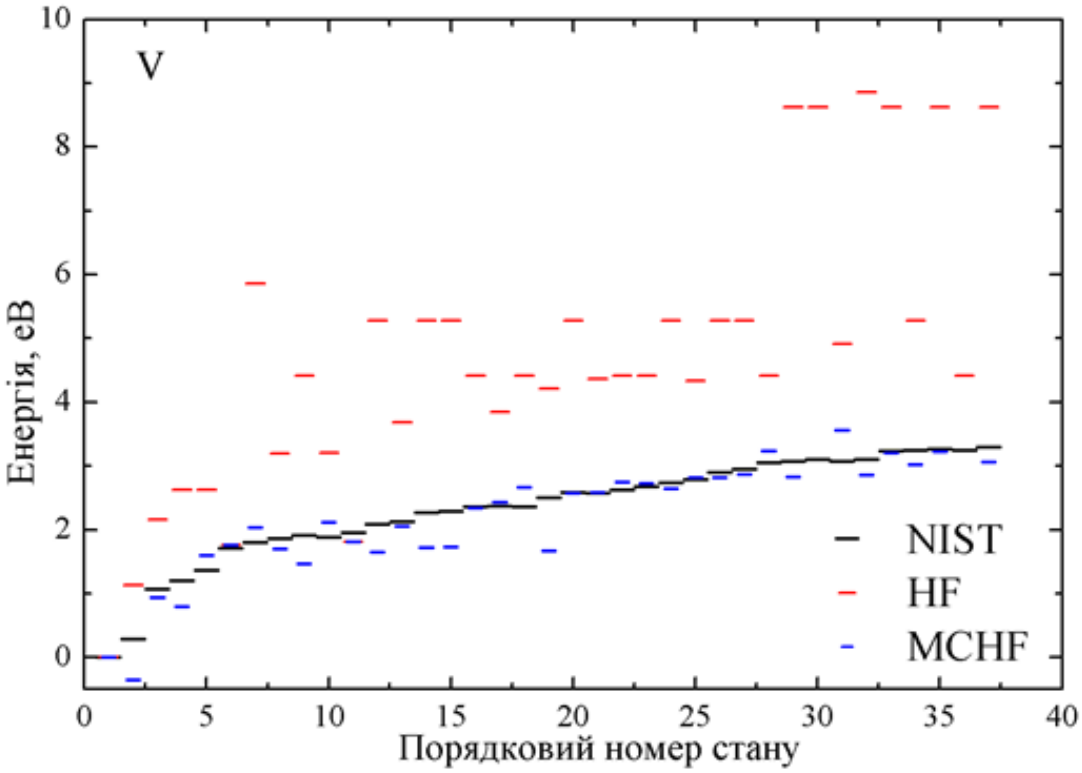


Рис. 1. Схема розміщення енергетичних порогів збудження E_{exit} атома ванадію за даними NIST [1] (чорні довгі штрихи). Дані наведені в LS-наближенні. Дані NIST порівняні з нашими одно-конфігураційними HF-розрахунками енергій спектроскопічних рівнів (червоні довгі штрихи) та багатоконфігураційними MCHF-розрахунками (сині короткі штрихи).

[1] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team, NIST Atomic Spectra Database version 5.6.1 (2018), (https://physics.nist.gov/asd).
[2] C. Froese Fischer, Comput. Phys. Commun., 64, 369 (1991).
[3] O. Zatsarinny, Comput. Phys. Commun., 174, 273 (2006).

ВПЛИВ ЛЕГУВАННЯ АТОМАМИ ІІІ ГРУПИ ЕЛЕМЕНТІВ НА ЕЛЕКТРОННУ СТРУКТУРУ ZnO

М.Коваленко[1], О.Бовгира[1], В. Дзіковський[1],
А.Кашуба[2], Г.Ільчук[2], Р.Петрусь[2], І.Семків[2]

[1]Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів
[2]Національний університет «Львівська політехніка»
e-mail: mariya.kovalenko@lnu.edu.ua

Оксид цинку (ZnO) – відомий широкозонний напівпровідник (E_g =3,37 еВ), з великою енергією зв'язку екситона (60 меВ) за кімнатної температури [1], який відіграє важливу роль у різних технологічних областях, таких як газові сенсори, прозорі провідні оксиди (TCO), рідкокристалічні дисплеї, прозорі тонкоплівкові транзистори, сонячні елементи та ін. Одним з ефективних способів зміни властивостей ZnO є його легування різного роду домішками. Останнім часом ZnO, легованому домішками Al, In та Ga, приділяють велику увагу як системі ZnO з n- типом провідності, досліджень про інші тривалентні домішки значно менше. Проте, властивості ZnO, легованого атомами Tl, La, Y та Sc, вказують на перспективу його використання як альтернативного матеріалу до TCO [2].

У цій роботі проведено теоретичні дослідження структурних та електронних властивостей ZnO, легованого атомами ІІІ групи елементів періодичної таблиці, зокрема атомами Tl, La, Y та Sc, з різною концентрацією домішки. Першопринципні розрахунки проведено в межах теорії функціоналу густини (DFT), використовуючи наближення узагальненого градієнта (GGA) з поправками Габбарда для точного опису електронної структури (GGA+U). Для розрахунку різних концентрацій легованих атомів ми розглянули суперкомірки 2 × 2 × 2 і 3 × 3 × 2, в яких один атом Zn заміщений одним атомом легуючої домішки і відповідає рівням легування 6,25 і 2,78%, відповідно.

Результати розрахунків показують, що параметри ґратки ZnO, легованого атомами Tl, Y, Sc та La, лінійно зростають зі збільшенням вмісту легуючої домішки. Внаслідок легування рівень Фермі зсувається вгору по енергетичні шкалі в зону провідності для всіх легованих систем незалежно від рівня концентрації домішки. Для всіх легованих систем ZnO встановлено, що оптична ширина забороненої зони зростає, а фундаментальна ширина забороненої зони зменшується зі збільшенням концентрації легуючої домішки. Сподіваємося, що отримані результати першопринципних розрахунків стануть корисними для цілеспрямованого проведення експериментальних досліджень впливу легування атомами ІІІ групи елементів періодичної таблиці на тонкі плівки ZnO.

[1] K.J. Kim, Y.R. Park, Appl. Phys. Lett. 78, 475 (2001).
[2] T. Minami, T. Yamamoto, and T. Miyata, Thin Solid Films: Japan, 366, 63 (2000).

ELECTRON INTERACTION WITH FREE AND CONFINED ATOMIC SYSTEMS

L.Sharma

Department of Physics, Indian Institute of Technology Roorkee, Roorkee, India
e-mail: lalita.sharma@ph.iitr.ac.in

In the talk I will present the recent research activities of our group at IIT Roorkee. The first part of the talk will be focussed on endohedral entrapment of atom inside fullerene cage which can be synthesized in laboratory owing to rapid development in experimental technology. The confinement of atoms leads to distinct and interesting changes in their physical and chemical properties. The spatial entrapment of atoms or molecules is possible in nature as well as artificially e.g., impurity atoms in mesoscopic scale semiconductor artificial structures, molecular zeolite sieves, fullerenes and quantum devices. I will discuss our latest results on elastic scattering of electrons from entrapped Ca atoms.

Study of atomic processes in plasma environment has received a great attention in recent years due to their important role in diagnostics of variety of plasmas. In plasma environments, screening of Coulomb interaction takes place due to presence of correlated many-particle interactions. As a result of screened Coulomb potential, the electronic structures of atomic systems embedded in hot and dense plasma environment may be remarkably different from their corresponding isolated candidates. In this connection I will discuss our recent investigations on electron impact excitation of plasma embedded Mg^+ from its ground state (3*s*) to the first excited state (3p) using relativistic distorted wave (RDW) theory together with the relativistic coupled-cluster (RCC) method to obtain the wavefunction of the Mg^+ at various plasma strengths.

In the last part of the talk, I will discuss our latest work on electron impact excitation of highly charged Xe ions. Studies on electron-atom collisions have been at forefront of the research in Atomic Physics for more than a century now. Nonetheless, investigating structural properties of atoms and ions as well as their interaction with charged or neutral projectiles continue to be intriguing part of the research. Extensive theoretical and experimental work is available on excitation of one and two valence electron atoms from their ground as well as excited states. However, electron impact studies for open shell atoms and highly charged ions (HCI) are rare and in great demand due to their various applications in understanding laser produced plasmas, extreme ultra-violet (EUV) and X-ray laser developments, inertial confinement fusion and astrophysics.

ВИЯВЛЕННЯ СЛІДІВ ЕНДОГЕННОГО АЦЕТОНУ ФЛУОРЕСЦЕНТНИМИ НАНОКОМПОЗИТАМИ АЕРОСИЛ-КУМАРИН 4

Я.П.Лазоренко, В.П.Міцай, А.Г.Мисюра

Інститут прикладних проблем фізики і біофизики НАН України, Київ, Україна.
e-mail: lazorenko85@gmail.com

У повітрі, що видихає людина, міститься кілька сотень різних летких речовин-метаболітів і газів, які потрапляють з кровотоку в альвеоли і бронхіальні структури легень. Більшість з них міститься в дуже низьких концентраціях і корелює з інтенсивністю певних процесів життєдіяльності організму або патологічних процесів.

Ацетон є одним з важливих і найбільш вивчених маркерів захворювань людини, таких як порушення обміну речовин при цукровому діабеті, панкреатиті, серцевій недостатності, раку легенів, а також деяких інших захворюваннях. Концентрація ацетону в повітрі, яке видихається, в межах 0.9 ppm (або 900 ppb) вважається нормою, а перевищення діапазону 0.9-1.8 ppm вказує на розвиток захворювання на ранній стадії або наявності явної патології [1, 2].

Метод вимірювання та аналізу концентрації ацетону у повітрі, яке видихається, розглядається як неінвазивний, що виключає болючі проколи шкіри і забори крові при інвазивному методі глюкозометрії крові з дорогими витратними матеріалами. Однак необхідність високої чутливості і селективності сенсора, стійкості до умов вологості і температури, стабільності і ряд інших характеристик обмежують пошуки нових сенсорних матеріалів і аналітичних рішень.

У нашій роботі вивчалися можливості посилення чутливості і селективності флуоресцентного сигналу нанокомпозитів на основі дисперсного кремнезему і кумаринових флуорофорів до низьких концентрацій ацетону в середовищі повітря, яке видихається.

Як флуоресцентно-чутливі елементи нами досліджувалися пористі нанокомпозитні дисперсні системи пірогенного диоксиду кремнію (sio_2) - аеросилу марки а-380 з питомою поверхнею 380 $м^2/г$, з імобілізованим флуоресцентним органічним барвником 7-гідрокси-4-метилкумарином (також має назву кумарин 4). Плівкові зразки формувалися методом прямого пресування порошку аеросилу. Імобілізація барвника на поверхню наночастинок аеросилу проводилася шляхом сорбції з розчину в етанолі.

Фотолюмінесцентні властивості синтезованих нанокомпозитів реєструвалися на спектрофотометрі specord m-40 uv-vis (виробник carl zeiss) з приставкою для вимірювання флуоресценції і на спектрометрі sl40-2 (виробник solar tii). Вимірювання кінетики флуоресценції зразків проводилося у спеціально розробленій установці на основі спектрофотометра specord m-40 uv-vis з приставкою для вимірювання флуоресценції. При цьому збудження флуоресценції проводилося на довжині хвилі максимуму смуги збудження

флуоресценції зразків – 335 нм, реєстрація інтенсивності флуоресценції проводилася в діапазоні 360–900 нм, тобто з використанням світлофільтра, прозорого в цій області. Під час вимірювання відбувалося прокачування модельних сумішей повітря, яке видихається, з заданими мікроконцентраціями ацетону або етанолу через кварцеву комірку зі зразком. Обсяг прокачуваної суміші становив 1 літр при всіх вимірах. Модельні зразки газових сумішей з заданими мікроконцентраціями летких молекул отримували на спеціально розробленій установці з отримання газових сумішей так званим статичним об'ємним методом.

В результаті проведених експериментів встановлено, що зразки нанокомпозитів аеросилу а-380 з імобілізованим кумарином-4 показують виражену сенсорну чутливість до мікроконцентрацій ацетону, яка проявлялася падінням інтенсивності флуоресценції зразків за рахунок гасіння флуоресценції кумарину 4 при сорбції молекул ацетону на поверхні пор аеросилу. Так, в результаті дослідження кінетики флуоресценції синтезованих нанокомпозитів виявлено, що при прокачуванні чистого повітря без додавання ацетону (умовно концентрація ацетону 0 ppm), інтенсивність флуоресценції плівки залишалася практично незмінною. При прокачуванні модельних сумішей повітря, яке видихається (повітря з домішкою ацетону в діапазоні 3-15 ppm) протягом 120 секунд, спостерігалося статистично значуще зниження інтенсивності флуоресценції зразків на 0,06-0,43 % відповідно (середньоквадратичне відхилення було в межах 0,01-0,03%). Зменшення інтенсивності флуоресценції було строго пропорційним концентрації ацетону в модельних сумішах повітря, яке видихається, що вказує на можливості використання величини зміни інтенсивності флуоресценції як сенсорного сигналу. Згодом прокачування чистого повітря без домішок ацетону через комірку зі зразком протягом 250 секунд призводило до практично повного відновлення інтенсивності флуоресценції плівки і її сенсорних властивостей. Аналогічні дослідження з додаванням етанолу замість ацетону в модельні повітряні суміші показало слабке збільшення інтенсивності флуоресценції, яке було також пропорційно концентрації речовини і було в 8,8 разів менше (за абсолютною величиною) від таких змін інтенсивності для аналогічних концентрацій ацетону. Цей результат вказує на значну селективність сенсорного сигналу таких плівок до ацетону порівняно з етанолом.

Отримані результати свідчать про виражену сенсорну чутливість нанокомпозитів аеросилу а-380 з імобілізованим кумарином-4 до мікроконцентрацій ацетону (3-15 ppm) в модельних сумішах повітря, яке видихається, селективність до етанолу, невеликий час сенсорного відгуку (120 с) і релаксації (250 с), що вказує на можливість застосування таких сенсорних елементів у недорогих і чутливих медичних неінвазивних діагностичних приладах.

[1] S. Das, M. Pal, J. Electrochem. Soc. 167, 037562 (2020).
[2] Y. Y. Broza, X. Zhou, M. Yuan et al., Chem. Rev. 119, No. 22, 11761 (2019).

РОЗРОБКА ПРОСТОГО ЕФЕКТИВНОГО 2D ТЕЛЕСКОПА ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ МЮОНІВ КОСМІЧНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

В.С.Лебедь, О.Б.Бацевич, О.А.Безшийко, Л.О.Голінка-Безшийко

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, Київ
e-mail: vitalikklebed@gmail.com

Наша планета безперервно опромінюється високоенергетичним космічним випромінюванням. Це випромінювання майже повністю складається з протонів високої енергії (у середньому 10 Гев) та кількох відсотків ядер гелію (альфа-частинок). Магнітне поле та атмосфера Землі захищають нас від цього випромінювання. При взаємодії з ядрами хімічних елементів атмосфери протони утворюють нові частинки – мезони різних типів (вторинне космічне випромінювання). Мезони мають короткий час життя, у результаті розпаду π-мезона утворюється мюон. Мюон можна назвати старшим братом електрона, що також має заряд, що рівний заряду електрона, масу (приблизно в 200 разів важчий) та має велику проникну здатність. У середньому інтенсивність мюонного випромінювання на рівні поверхні моря – мюон/дм^2. На відміну від радіоактивних зразків, мюони не потребують особливих вимог для роботи з ними. Таким чином мюони є доступними та відкритими для дослідження не тільки для вчених зі спеціальними дозволами, а і для студентів та школярів.

У роботі представлено недорогий та ефективний прототип 2D телескопа, що дозволить перевірити можливості проводити не тільки навчальні експерименти для студентів (наприклад, визначення часу життя мюону), але і використовувати таку систему для цілого ряду прикладних задач: пошуку ядерних матеріалів, порожнин і порушень цілісності у великих спорудах (стародавні піраміди, вулканічні утворення [1], великі промислові об’єкти з безперервним циклом роботи).

Розроблена установка являє собою систему з кількох детекторів типу RPC. RPC (Resistive Plate Chamber) – це газовий детектор заряджених частинок (який широко застосовується у фізиці високих енергій), що використовує велике постійне і рівномірне електричне поле між двома паралельними електродами, що виготовляють із пластин із високим опором, які розділені об’ємом газу.

Потрапляючи в область високої напруги у газовому проміжку, мюон викликає лавинну іонізацію молекул газу, утворюючи таким чином достатній для реєстрації заряд. Розряд локалізований у невеликій площі ~0.1 см^2, через високий опір електродів та характеристики газу. Тривалість розряду зазвичай становить декілька наносекунд з можливістю забезпечити часову роздільну здатність у найкращих випадках близько 100 пікосекунд. За допомогою електропровідних зчитуючих смужок, що розміщені із зовнішніх сторін електродів можна забезпечити реєстрацію заряду із незначною затримкою в часі. Реєструючи сигнали на конкретній смужці на поверхні детектора, можна отримати координату прольоту мюону на площині 2D. За допомогою двох RPC

можна отримати відповідно дві координати прольоту мюону на площині 2D. Використання RPC дозволяє поєднати хорошу просторову та часову роздільні здатності [2].

Розроблений детектор складається з площин, кожна з яких представляє собою два скляні електроди. В утворений зазор запускається спеціально підготовлений газ. Високе електричне поле забезпечується на зовнішніх частинах електродів через провідне покриття. Це формує рівномірну напругу на всій площині детектора. Утворений зарядженою частинкою сигнал, наводиться на провідних смужках, що нанесені на ізолятор, який у свою чергу розміщений на зовнішній поверхні електродів. За допомогою фронт-енд електроніки детекторної системи сигнал зчитується та аналізується. Отримані сигнали можна вивести на екран монітору у вигляді їхнього розподілу по площині детектора, створити людино-машинний інтерфейс.

Потрібно забезпечити такі умови експерименту, щоб розуміти, що зареєстровані частинки точно є мюонами. Для відділення сигналів від мюонів та фону дві детекторні площини RPC розміщуються одна навпроти одної та досліджуються співпадіння сигналів. Наносекундні сигнали дозволяють отримати високу часову роздільну здатність і відповідно ефективне відокремлення від фонових сигналів. Додатково фон можна зменшити, якщо між детектуючими пластинами розмістити шар речовини з важкого елементу, наприклад свинцю. Окрім свинцю перевірялися інші матеріали. Також було проведено дослідження для покращення просторової роздільної здатності та перевірені різні типи зчитувальної електроніки. Якщо електронна схема реєструє два одночасні сигнали із двох детекторних площин – частинка пройшла робочий об’єм в обох детекторах. Як наслідок маємо дві точки проходження частинки, пряму, задану цими точками, та, заданий прямою, кут до вертикалі, під яким рухався мюон. Це дозволяє визначити час життя мюону, визначаючи кількість частинок під різними кутами.

При цьому кількість даних виходить значною – під усіма кутами на один квадратний дециметр поверхні детектора падає один мюон в секунду, всі ці мюони реєструються і їх кут добре визначений, якщо детектуючі площини розташовані достатньо далеко одна від одної. Якщо ж розмістити дві детектуючі площини вгорі, дві внизу, а між ними невідомий матеріал, то за рахунок сильної залежності розсіяння мюонів від Z розсіювача можна знаходити, наприклад ядерні матеріали, що можуть перебувати в купах металевого брухту.

Установка перш за все буде використана для проведення лабораторної роботи «Час життя мюону» на кафедрі ядерної фізики.

У подальшому планується розробити детектори більшої площі для наукових прикладних досліджень.

[1] Інтернет-ресурс: https://nplus1.ru/material/2015/10/27/muons
[2] Detector Physics of Resistive Plate Chambers, Frankfurt am Main, 2003, p.193.

СИНТЕЗ І ОПТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОЛОЇДНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК Ag–In–S

Б.В.Лопушанська

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: lopushanska5@gmail.com

Розчинні у воді колоїдні квантові точки (КТ) Ag–In–S, відомі завдяки їх інтенсивній люмінесценції, є надзвичайно перспективними для застосування як джерела світла, сонячні елементи, у фотокаталізі та біології [1, 2]. Наше дослідження присвячено синтезу та визначенню оптичних характеристик фракціонованих за розміром нестехіометричних КТ Ag–In–S, синтезованих з водних розчинів $AgNO_3$, $InCl_3$ та Na_2S у присутності глутатіону (GSH) чи меркаптооцтової кислоти (MAA). Фракціонування колоїдних розчинів за розміром КТ проводилося шляхом багаторазового центрифугування при 4000 об/хв з послідовним додаванням порцій поганого розчинника (2 пропанолу).

Колоїдні розчини з КТ Ag–In–S було проаналізовано за допомогою оптичного поглинання (Cary 50), фотолюмінесценції (Shimadzu RF–6000) та раманівської спектроскопії (LabRAM, $\lambda_{зб}$ = 488 нм та XploRA Plus, 532 нм). Край оптичного поглинання та максимуми фотолюмінесценції зміщуються в бік нижчих енергій зі зростанням номера фракції (зменшенням розміру КТ). Значення ширини забороненої зони E_g для кожної фракції визначали зі спектрів оптичного поглинання, перебудованих в координатах $(\alpha h\nu)^2$ як функція $h\nu$ (де α – коефіцієнт поглинання) для прямозонних напівпровідників шляхом екстраполяції лінійної ділянки до перетину з віссю енергій. Середній розмір КТ було оцінено за значеннями ширини забороненої зони з урахуванням відомої кореляції між розміром КТ, визначеним з даних E_g, та на основі просвічувальної електронної мікроскопії [1]. Величина зсуву Стокса зростає зі зменшенням розміру КТ від 0,14 еВ (для КТ діаметром 3,2 нм) до 0,48 еВ (для КТ, менших за 2 нм).

Проаналізовано еволюцію спектрів поглинання синтезованих КТ Ag–In–S при тривалому (6 місяців) зберіганні колоїдних розчинів при кімнатній температурі. Показано, що розчини з КТ, отриманими в присутності GSH, демонструють кращу стабільність, ніж розчини з КТ, синтезованих з MAA.

Аналіз раманівських спектрів синтезованих нестехіометричних КТ Ag–In–S дозволив пов'язати спостережувані смуги з відповідними коливаннями зв’язків Ag–S та In–S.

[1] A. Raevskaya, V. Lesnyak, D. Haubold, V. Dzhagan, O. Stroyuk, N. Gaponik, D.R.T. Zahn,A. Eychmüller, J. Phys. Chem. C 121, 9032 (2017).
[2] O. Stroyuk, A. Raevskaya, F. Spranger, O. Selyshchev, V. Dzhagan, S. Schulze, D.R.T.Zahn, A. Eychmüller, J. Phys. Chem. C 122, 13648 (2018).

ФРАКТАЛЬНІ МОДЕЛІ В'ЯЗКОПРУЖНОСТІ СТЕКОЛ

Я.І.Лисаченко

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: yaroslavali44@gmail.com

У даній роботі досліджена можливість використання процедури інтегрування та диференціювання дробового порядку для пояснення в'язкопружних властивостей стекол, оскільки використання даних операторів для опису співвідношень між напруженнями та деформаціями дало змогу врахувати наявність необоротних явищ, зумовлених реологічними властивостями матеріалу, а також спостережувану експериментально неекспоненціальну релаксацію у твердих тілах.

При побудові класичних реологічних моделей часто використовують найпростіші структурні елементи, якими є ідеальна пружини з визначальним співвідношенням у вигляді закону Гука σ = Eε та в'язкий елемент – циліндр з поршнем, заповнений в'язкою рідиною, з визначальним співвідношенням у вигляді закону Ньютона σ = ηdε/dt де σ – механічне напруження, ε та dε/dt – відносна деформація та швидкість її зміни, E – модуль пружності (Юнга або зсуву), η – коефіцієнт в'язкості. Комбіновані з'єднання цих елементів відомі як моделі Максвела, Кельвіна-Фойгта, стандартного лінійного тіла дають якісне пояснення в'язкопружних властивостей кристалічних та склоподібних тіл, зокрема полімерів. Як видно з наведених формул у закони Гука та Нютона входять похідні нульового та першого порядку по часу від деформації і їх можна представити спільним рівнянням [3]

$$\sigma = G^{1-\alpha}\eta^{\alpha}\cdot\frac{d^{\alpha}\varepsilon}{dt^{\alpha}} = G\tau^{\alpha}\cdot\frac{d^{\alpha}\varepsilon}{dt^{\alpha}}, \qquad (1)$$

де $0 \le \alpha \le 1$ - довільний параметр, який представляє порядок похідної, а $\tau = \eta/G$ - характерний час. Коли $\alpha = 0$ і $\alpha = 1$ маємо справу зs звичним (цілочисельним) оператором похідної і відповідною трансформацією механічної моделі (рис.1):

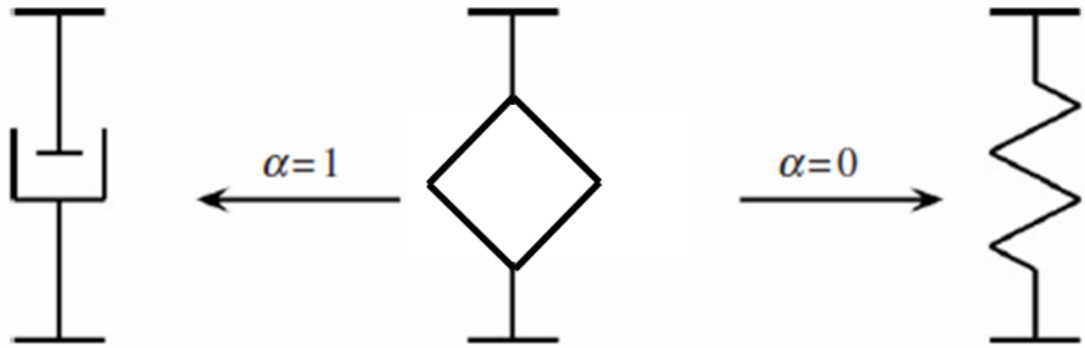


Рис. 1. Схема пружинного демпфера як елемента, який є проміжним між ідеальною пружиною ($\alpha = 0$) та демпфером (α = 1).

Г. У. Скотт-Блер та його співробітники використовували вирази типу (1) як самостійні рівняння; але пізніше Келлер прирівняв цю канонічну модель відгуку до механічного елементу, який називається пружинний демпфер («spring-pot»), іноді відомий як елемент Скотта-Блера, і визначив його як фундаментальний блок, з якого могли бути побудовані більш складні реологічні моделі. Якщо σ в рівнянні (1) є одиничною функцією Хевісайда

$$\sigma = \sigma_0 \cdot H(t) = \sigma_0 \cdot \begin{Bmatrix} 0, & t \le 0 \\ 1, & t \ge 0 \end{Bmatrix} \quad \text{і} \quad \sigma_0 = 1 \quad , \tag{2}$$

то нормована реакція системи $y(t$, наприклад поведінка повзучості пружинно-демпферного механічного елемента, описується виразом:

$$y(t) = \frac{1}{\Gamma(1+\alpha)} \left(\frac{t}{\tau}\right)^{\alpha} \quad . \tag{3}$$

На рис. 2 показана залежність реакції системи від безрозмірного часу t/τ для різних значень параметра α.

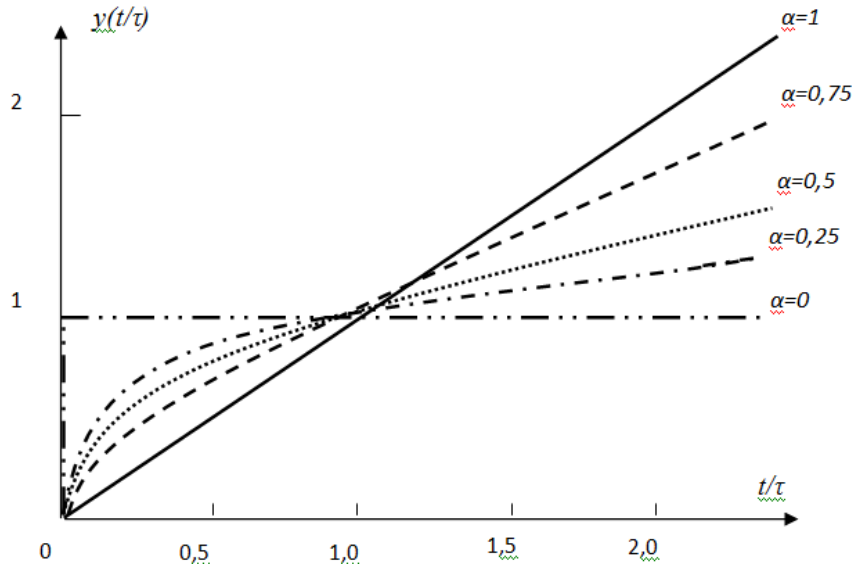


Рис.2. Залежність нормалізованого відгуку системи y від безрозмірного часу t/τ для різних значень параметра α.

Як видно, пружинно-демпферний елемент Скотта-Блера описує гладкий, безперервний і монотонний перехід від пружної ($\alpha = 0$) до в'язкої ($\alpha = 1$) поведінки при зміні α у межах від 0 до 1. Параметр α характеризує фрактальну структуру (компоненту, що демонструє проміжну поведінку між консервативними (пружиною) та дисипативними (демпфером) елементами.

Таким чином, фрактальна похідна виявляється дуже корисною в дослідженнях часових залежностей (релаксацій), оскільки початкові умови для диференціальних рівнянь дробового порядку можуть бути задані так само, як для звичайних з відомим фізичним тлумаченням. Дробові похідні служать інструментом для опису пам'яті та спадкових властивостей різних матеріалів і процесів. Це головна перевага фрактальних моделей у порівнянні з класичними, в яких такі ефекти не враховуються.

ГЕНЕРАЦІЯ НЕЙТРОНІВ ГАЛЬМІВНИМИ ГАММА-КВАНТАМИ

[1]В.О. Мартишичкін[1], Є.А. Гарапко[1], І.І. Гайсак[1],
Ж. Хушвактов[2], А.А. Солнишкін[2]

[1]ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
[2]Об'єднаний інститут ядерних досліджень, Дубна, Росія
e-mail: vasul.martushychkin@uzhnu.edu.ua

Наявність у науково-дослідному центрі нейтронних пучків дозволяє реалізувати ряд ефективних методів дослідження кристалічної структури і динаміки впорядкованих конденсованих середовищ [1].

В нашій роботі проведено дослідження генерації нейтронів на мікротроні М-10, який прискорює електрони до відносно низьких енергій 10 МеВ. Схему експерименту показано на Рис. 1. Виведений пучок електронів падає на конвертаційну вольфрамову мішень товщиною 2 мм. Нейтрони утворюються в реакції $\gamma+^{9}Be \rightarrow n+\alpha+\alpha$ на берилієвій мішені, товщиною 14 см, вагою 2 кг. Для визначення густини потоку нейтронів використано активаційну методику з застосуванням реакції (n, γ) для активаційної мішені ^{59}Co та ^{115}I. Гамма-спектри активованих мішеней вимірювалися сцинтиляційним гамма-спектрометром на основі кристалу NaI(Tl) розміром Ø63x63 мм (Рис. 2). Роздільна здатність спектрометра (FWHM) для ліній ^{60m}Co 58,6 кеВ (ізомерний стан, $T_{1/2}$=10,47 хв.) складає 28% та 7% для добре відомих ліній 1173 кеВ і 1332 кеВ.

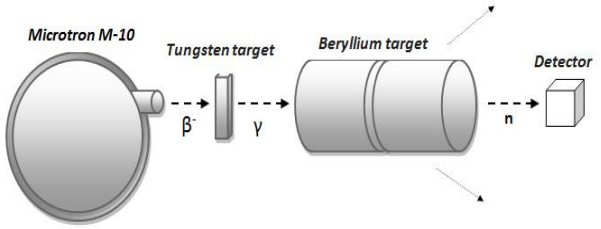


Рис. 1. Схема експерименту.

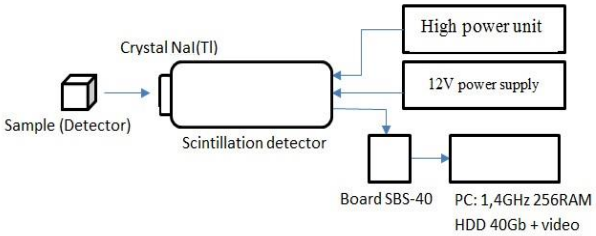


Рис. 2. Блок-схема спектрометра.

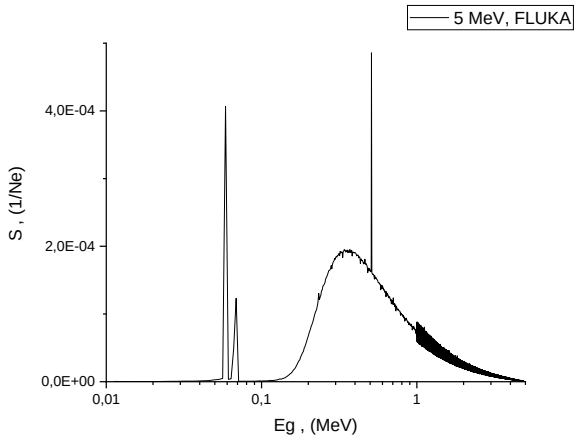


Рис. 3. Гальмівний гамма-спектр при енергії виведеного пучка 5 МеВ.

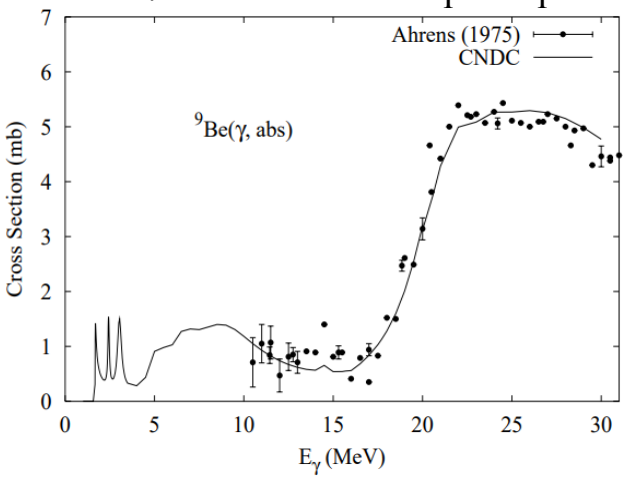


Рис. 4. Енергетична залежність перерізу ядерної реакції $^{9}Be(\gamma,n)$ [4].

На Рис. 3 наведено гальмівний спектр, що падає на берилієву мішень, розрахованого методом Монте-Карло [2,3], виведеного пучка електронів 5 МеВ. Там же представлено дві характеристичні лінії атома вольфраму ($K_{\alpha 1}$ = 59.3 кеВ, $K_{\beta 1}$=67.2 кеВ) та анігіляційна лінія 0,511 МеВ. Моделювання показує, що ця форма гальмівного спектру зберігається для енергій електронів до 10 МеВ, а саме, пік спектрів лежить в межах 0,3-0,4 МеВ. На Рис. 4 показано енергетичну залежність перерізу реакції $\gamma+^{9}Be \rightarrow n+X$ [4], поріг якої складає 1,67 МеВ.

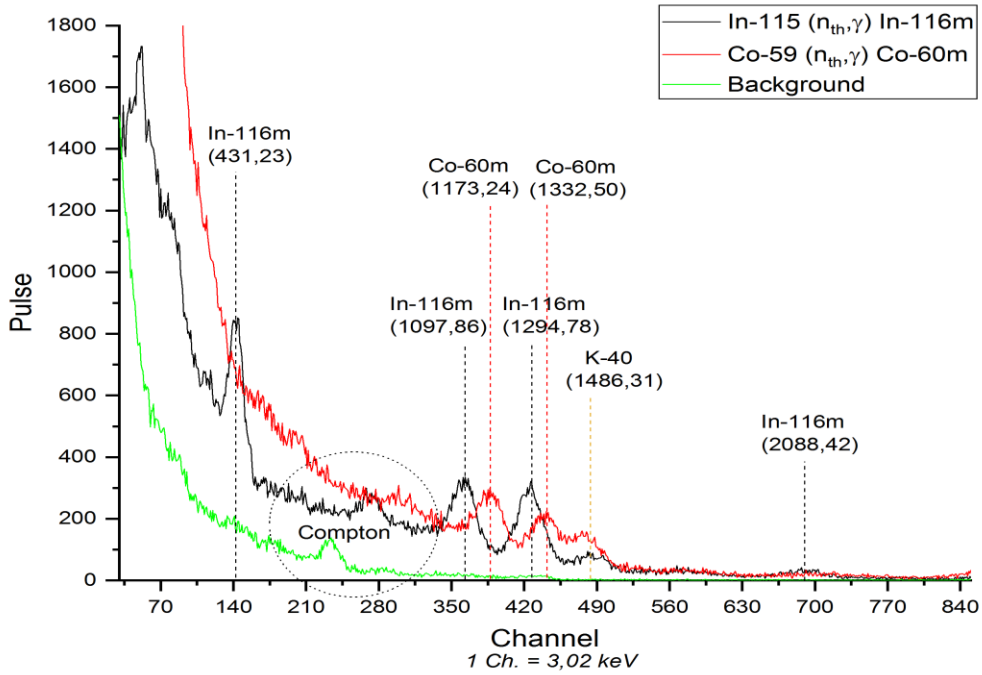


Рис. 5. Гамма-спектри з сцинтиляційного спектрометра від активованих нейтронами мішеней ^{59}Co, ^{115}I та фону.

На Рис. 5 показано гамма-спектри від активованих нейтронами мішеней ^{59}Co, ^{115}I та фону. В спектрі індію чітко виділяються три лінії 431, 1098 1295 кеВ. Для спектру від кобальту видно дві відомі лінії стандартного кобальтового джерела 1173 та 1332 кеВ.

[1] Measurement of residual stress in materials using neutrons. International Atomic Energy Agency, IAEA-TECDOC-1457 (2005).
[2] A. Ferrari, P.R. Sala, J. Ranft, U. Siegen, FLUKA: A Multi-Particle Transport Code. SLAC-R-773. (2015).
[3] I.I. Haysak, O.V. Takhtasyev, R.R. Holomb, K. Katovsky, A. Tanchak, J. Khushvaktov, A.A. Solnyshkin Monte Carlo simulation of bremsstrahlung spectra for low energy electron accelerators // 2020 21st International Scientific Conference on Electric Power Engineering (EPE), Prague, Czech Republic, 2020, pp. 120-124.
[4] Handbook on Photonuclear Data for Applications. Cross-sections and Spectra. International Atomic Energy Agency, IAEA-TECDOC-1178, 2000.

ДІЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СКЛОПОДІБНОГО СЕЛЕНУ ПОБЛИЗУ ТЕМПЕРАТУРИ КРИСТАЛІЗАЦІЇ

В.В.Мінькович, А.А.Горват

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: mink_vv@meta.ua

Досліджен̆ температурно-частотні залежності складових комплексної діелектричної проникності ε*= ε'+*i*ε" зістареного протягом десятків років у нормальних умовах склоподібного селену та його омолоджених зразків, отриманих переплавленням, в діапазоні частот від 10 Гц до 50 кГц та при температурах від 293 К до 429 К. Початково масивні зразки склоподібного селену отримували кілька десятків (30-35) років тому назад звичайною методикою різкого гартування розплаву використовуючи високочистий Se (99,999%) у виді гранул. Селен розплавляли в горизонтальній печі, нагрівали до 500-550°С (770-820 К) і витримували при цій температурі щонайменше 24 години з періодичним перемішуванням. Різке охолодження розплаву здійснювали зануренням ампул з розплавом у суміш води та льоду. Таким чином отримані склоподібні злитки селену зберігалися при кімнатній температурі в темряві на повітрі протягом десятиліть. Для омолодження (пересклування) зістарений склоподібний селен, отриманий за описаною вище процедурою, повторно піддавали аналогічній технологічній обробці і перед дослідженням витримували лише кілька днів, щоб уникнути швидких процесів релаксації.

Температурні залежності діелектричних констант ε' та ε" при частотах омолодженого зразка селену під час першого нагрівання, показані на рис. 1, *a*, *b*. Нижче кімнатної температури ε' майже постійне, а значення ε" - незначне. Тому вимірювання проводилися лише для температур вище 290К. При температурі, близькій до температури склування T_g, значення ε' і ε" починають зростати. Залежність ε'(Т) в області T_g на декількох частотах показана у вставці до рис. 1*a*. У тому ж діапазоні температур діелектрична дисперсія стає досить помітною. У температурному діапазоні кристалізації скла (365К - 375К) спостерігаються максимуми ε' і ε", які накладаються на монотонне зростання цих параметрів з підвищенням температури.

Аналогічні залежності для зістареного склоподібного селену представлені на рис. 1 *c*, *d*. Для більш чіткого подання отриманих результатів на рис. 1 *c*, *d*. температурні залежності ε' та ε" показані в логарифмічному масштабі. Слід зазначити, що в діапазоні температур $T < T_g$ значення ε' і ε" для зістарених зразків склоподібного селену набагато вищі (навіть у десять разів залежно від частоти вимірювального поля), ніж у повторно засклованих зразках. Найбільш суттєва різниця в поведінці діелектричних констант спостерігається в області кристалізації, а саме аномалії, пов'язані з кристалізацією в зістарених стелах, спостерігаються при значно (приблизно на 35К) нижчих температурах і мають дуже різку форму в порівнянні з омолодженими зразками.

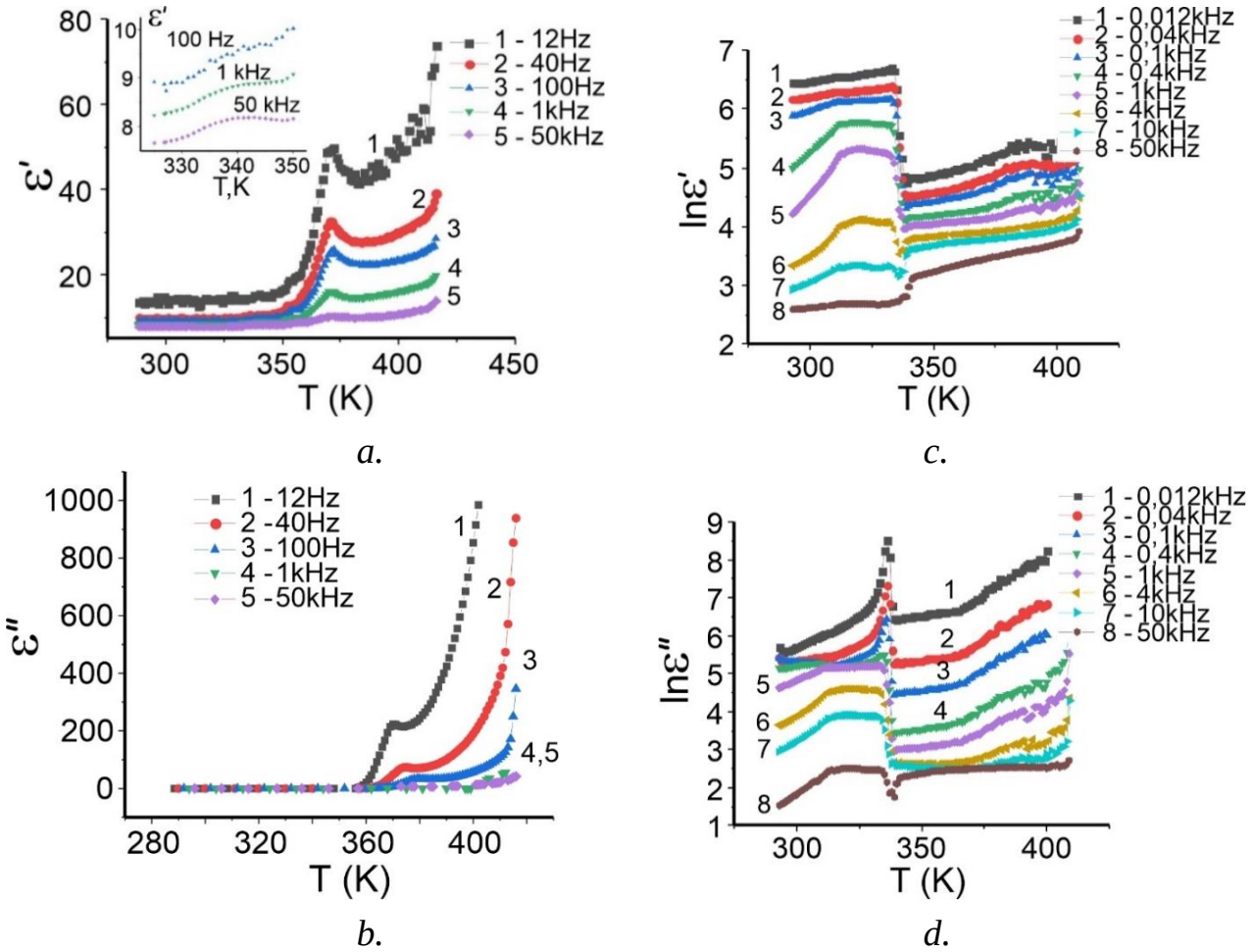


Рис. 1. Температурні залежності дійсної ε' (*a, c*) та уявної ε' '(*b, d*) частин комплексної діелектричної проникності ε*, отримані в омолодженому (*a, b*) та зістареному (*c, d*) зразках склоподібного селену

Отримані результати свідчать про появу внаслідок процесу тривалої структурної релаксації скла додаткового механізму поляризації, який вносить істотний внесок у діелектричну проникність.

Відомо, що процес кристалізації скла визначається двома факторами: утворенням центрів кристалізації (зародків) та зростанням на них кристалів. Ці процеси взаємопов’язані, і лише наявність цих двох факторів призводить до помітної кристалізації скла. Процес зародкоутворення пов'язаний з локальною зміною структури, тобто структурною релаксацією, яка вимагає тривалого часу при кімнатній температурі; це можна охарактеризувати як процес перебудови ближнього порядку. У той же час, через відносно високу в'язкість скла при кімнатній температурі, швидкість росту кристалів є низькою, оскільки вимагає значних атомних переміщень.

Ми припускаємо, що у зістареному в порівнянні з щойно загартованим склоподібним селеном в результаті структурної релаксації наявні кластери зародків кристалічної фази в аморфній матриці скла, а перехідні області між ними обумовлюють додатковий механізм поляризації та відповідну діелектричну дисперсію.

КОМПОЗИТНІ НАНОСТРУКТУРНІ ПЛІВКИ З ФЛУОРОФОРАМИ І КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ ДЛЯ ВИЯВЛЕННЯ ЛЕТКИХ МОЛЕКУЛ АМІАКУ

В.Міцай, Я.Лазоренко, А.Мисюра

Інститут прикладних проблем фізики і біофизики НАН України, Київ, Україна.
e-mail: vitapok@i.ua

Швидкий розвиток нанотехнологій призвів до виникнення пов'язаних з ними різних напрямків у природничих науках і підвищив інтерес до їх застосування для вирішення різних прикладних задач. На сьогоднішній день активно ведуться роботи в області створення сенсорів для використання в біології, медицині та екології на основі наноматеріалів. Для цих цілей використовуються різні види наноматеріалів: наночастинки, нанокластери, нанокристали і квантові точки, які можуть бути внесені в різні органічні або неорганічні матриці (моношари або плівки) [1]. Також великий інтерес викликають дослідження гібридних наноструктур, які складаються з напівпровідникових нанокристалів або квантових точок і органічних молекул.

Оптичні флуоресцентні хемосенсори основані на ефекті зміни оптичних властивостей молекули індикатора при її взаємодії з аналітом. Молекула-індикатор зазвичай являє собою молекулу барвника або іншої речовини, що володіє специфічними спектральними властивостями. Такі сенсори належить до числа найбільш перспективних через їх високу чутливість флуоресцентного сигналу до різних агентів, що дає можливість детектування наднизьких концентрацій аналітів.

Проблема виявлення та вимірювання малих концентрацій летких сполук актуальна як для моніторингу складу повітря в навколишньому середовищі, так і для неінвазивної діагностики стану здоров'я людини.

У повітрі, яке видихає людина, вченими було виявлено близько 2500 сполук. Деякі з них можна віднести до діагностично-значущих біомаркерів, що входять в симптомокомплекс певних захворювань. Однією з таких сполук є аміак, біомаркер таких захворювань, як ниркова недостатність, рак легень, захворювання печінки та ін. [2].

У цій роботі ми повідомляємо про результати синтезу і дослідження газосенсорного композитного матеріалу, основаного на флуорофорному комплексі, до складу якого входять флуоресцентні квантові точки CdTe з піком флуоресценції на довжині хвилі 530 нм, стабілізовані тіогліколевою кислотою і органічні молекули кумарин-7 з довжиною хвилі поглинання 435 нм, чутливому до летких молекул аміаку. Як полімерна матриця газосенсорного матеріалу було використано етиленвінілацетат (EBA), який має високу

стійкість до розчинників, є хорошим плівкоутворювачем та оптично прозорий у видимій області.

Для виготовлення композитних структур на розігріті скляні підкладки наносили шар полімеру EBA, який покривався моношаром мікропористого диоксиду кремнію (SiO_2), з розмірами гранул 37-63 мікрони і з питомою площею поверхні 500 ± 50 $м^2$/г. На отриманий двошаровий композит наносили суміш етанольного розчину барвника кумарин-7 з водним розчином колоїдних квантових точок (CdTe/TGA) у співвідношенні (1:1). Отриманий композит піддавали сушці при температурі 65-70 ºС.

Спектри поглинання і спектри збудження флуоресценції газосенсорного нанокомпозитного матеріалу вимірювалися на спектрофотометрі Specord M40 UV-VIS з приставкою для вимірювання флуоресценції. Флуоресценцію зразків, а також їх флуоресцентний відгук на аміак реєстрували на автоматизованому флуориметрі Flx-800T.

Спектр поглинання барвника кумарину-7 і спектр флуоресценції квантовий точок CdTe мають певну ступінь перекриття. Наявність такого перекриття є необхідною умовою для здійснення Ферстерівського перенесення енергії. Нами показано, що введення квантових точок CdTe до складу композиту підвищує інтенсивність його флуоресценції на 57% відносно інтенсивності флуоресценції композиту з кумарином-7, але без квантових точок.

Для синтезованих зразків матеріалу при контакті з аміаком реєструвалося падіння інтенсивності флуоресценції відносно вихідної величини. Концентрація аміаку в газовій суміші (повітрі) приймалася базовою, визначалися сигнали при її перевищенні в повітрі на 0.5, 1, 5, 10 ppm. При контакті синтезованих зразків з аміаком вказаних концентрацій спостерігалося падіння величини інтенсивності їх флуоресценції на 1%, 2%, 6%, 14% відповідно; а також виявлена здатність багаторазового відновлення сенсорних властивостей синтезованих зразків після прокачування через кювету зі зразком чистого повітря.

Продемонстрований істотний відгук створеного нами матеріалу на аміак, а наявність кореляції між значенням падіння сигналу флуоресценції досліджуваних зразків і зміною концентрації аміаку в пробі дає можливість у перспективі використовувати цей матеріал як чутливий елемент портативних сенсорів для неінвазивної діагностики захворювань і моніторингу навколишнього середовища.

[1] С.Н. Штыков , Т.Ю. Русанова. Рос. хим. журн. 52, 92 (2008).
[2] В.П. Міцай., А.Г.Мисюра, С.В.Кривець, Я.П.Лазоренко Журнал нано- та електронної фізики 8, 04032 (2016).

DOMAIN WALL PECULIARITIES BELOW LOCK-IN PHASE TRANSITION IN $SN_2P_2SE_6$ SINGLE CRYSTALS

A.Sh.Molnar, O.O.Shpenik

Ukrainian Hungarian Educational Scientific Institute,
Uzhhorod National University, Uzhhorod
e-mail: rodnashranlom@gmail.com

Recently much attention was paid to investigations of domain wall peculiarities in proper ferroelectrics with incommensurate phase of type II in the vicinity of a Lifshits point in the concentration (pressure) – temperature phase diagram [1,2]. Interesting phenomena can appear by transformation of domain structure into incommensurate (IC) modulation across lock-in transition near the Lifshitz point and vice versa – when domain dimensions start to be comparable to modulation wave length in the IC phase, we could expect their interference while going through IC-commensurate phase (CP) phase transition.

In paper [3] it has been mentioned that similar to $SC(NH_2)_2$ and $NaNO_2$ proper ferroelectrics with IC phase of type II $Sn_2P_2Se_6$ crystal shows clearly defined anomalies of temperature dependence of the dielectric constant below T_c. This behavior could be related to the peculiar form of domain walls and their temperature dependence in such materials. These peculiarities probably exist because of the strongly nonlinear potential of polarization fluctuation for crystals of $Sn_2P_2(Se_xS_{1-x})$ solid solutions.

To investigate the form of the domain walls in $Sn_2P_2(Se_xS_{1-x})$ crystals we use the well-known phenomenological theory[4]. The expansion of thermodynamic potential density function for this case is given by

$$f = \frac{\alpha}{2}P^2 + \frac{\beta}{4}P^4 + \frac{\gamma}{6}P^6 + \frac{\delta}{2}(\nabla P)^2 + \frac{g}{2}(\nabla^2 P)^2 + \frac{\lambda}{2}P^2(\nabla P)^2 \quad (1)$$

where the polarization is the order parameter, $\alpha=\alpha_T(T-T_0)$, T_0 is the temperature of the phase transition directly from paraelectric to ferroelectric phase, $\beta<0$, $\gamma>0$, $\delta<0$, $g>0$, $\lambda>0$. Minimizing the free energy per unit volume $F=(1/L)\int_0^L f(x)dx$ and applying boundary conditions of $P=\pm P_c$ for $x\rightarrow\pm\infty$, where P_c is the polarization in ferroelectric phase, we can obtain the form of domain wall[5]. As well known the P_c in ferroelectric phase has to satisfy the relation $\alpha P_c + \beta P_c^3 + \gamma P_c^5=0$. As it is usual we can put for the function which describes the form of the domain wall $P=P_v+P_c$ (where P_v is a variational part of spontaneous polarization and $P_v\rightarrow 0$ as $x\rightarrow\pm\infty$) and inserting it into the Euler-Lagrange equation which corresponds to the variational problem with thermodynamic potential density (1) we obtain the equation:

$$gP_v^{IV} + [\delta + \lambda P_c^2]P_v^{II} + [\alpha P_c + 3\beta P_c^2 + 5\gamma P_c^4]P_v = 0 \quad (2)$$

The solution of this equation defines the character of the approach of the order parameter to P_c when $x \to \pm\infty$.

The differential equation (2) is nonlinear and as for now no particular solution is known for it. This nonlinearity of equation (2) represents the strongly nonlinear character of potential for fluctuation of polarization. In papers [6,7] an approach was developed to get a numerical solution to variational problem with potential (1) in the temperature region of IC phase based on an multilevel genetic algorithm optimization (GA). We used this approach to investigate the problem of domain walls e.g. the finding of numerical solution of differential equation (2). In accordance with principles of GA we create the population of N specimens. Each specimen is the representation of order parameter distribution in the domain wall and actually is a vector of dimension n. Selection of the specimens was carried out according to how low the functional level can be attained. For the initial distribution we used different functions:

$$P(x) = a \cdot sin^3(x) \quad (3)$$

$$P(x) = a \cdot sn(bx, \mu) \quad (4).$$

The algorithm was implemented in *Mathematica*®. Calculations were performed using different initial distribution in order to avoid dependence of final result on starting conditions. Nevertheless the calculations showed that using the initial specimen distribution (4) a deeper level of thermodynamic potential can be obtained.

With data on coefficients of equation (1), and values of T_0 and P_c from [8] we have found that around temperature T_x=185 K the change of character of the order parameter approach to P_c occurs. Upon the oscillatory approach of polarization to the values of P_c in the domain wall the interactions between the domain walls also have an oscillatory character.

[1] B.-K.Lai, I.Ponomareva, I.A. Kornev, I. Bellaiche, and G.J. Salamo, Phys.Rev. B 75, 085412 (2007).
[2] E.A. Eliseev, S.V. Kalinin, Y.Gu, M.D. Glinchuk, V.Khist, A. Borisevich, V.Gopalan,L.-Q.Chen, and A.N. Morozovska. Phys.Rev. B.88, 224105 (2013).
[3] H.Mashiyama, M.Sakamoto and S.Jida, Ferroelectrics, 105, 273 (1990)
[4] Y.Ishibashi, J.Phys.Soc.Japan, 56, 2017 (1985)
[5] T.Mashiyama and H.Mashiyama. J.Phys.Soc.Japan, 56, 1810 (1987)
[6] V.Yu. Korda, S.V.Berezovsky, A.S. Molev, L.P. Korda, and V.F. Klepikov. Physica B: Condenced Matter, 407, 3388 (2012).
[7] V.Yu. Korda, S.V.Berezovsky, A.S. Molev, L.P. Korda, and V.F. Klepikov. Physica B: Condenced Matter, 426, 31 (2013).
[8] Y.M.Vysochanskii and V.Y.Slivka. Soviet Physics Uspekhi. 35, 123 (1992).

РЕНТГЕНОЛЮМІНЕСЦЕНЦІЯ АРОМАТИЧНИХ АМІНОКИСЛОТ

І.Мошкола, Є.Світличний, В.Красилинець, О.Гомонай

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail:bercheni14@gmail.com

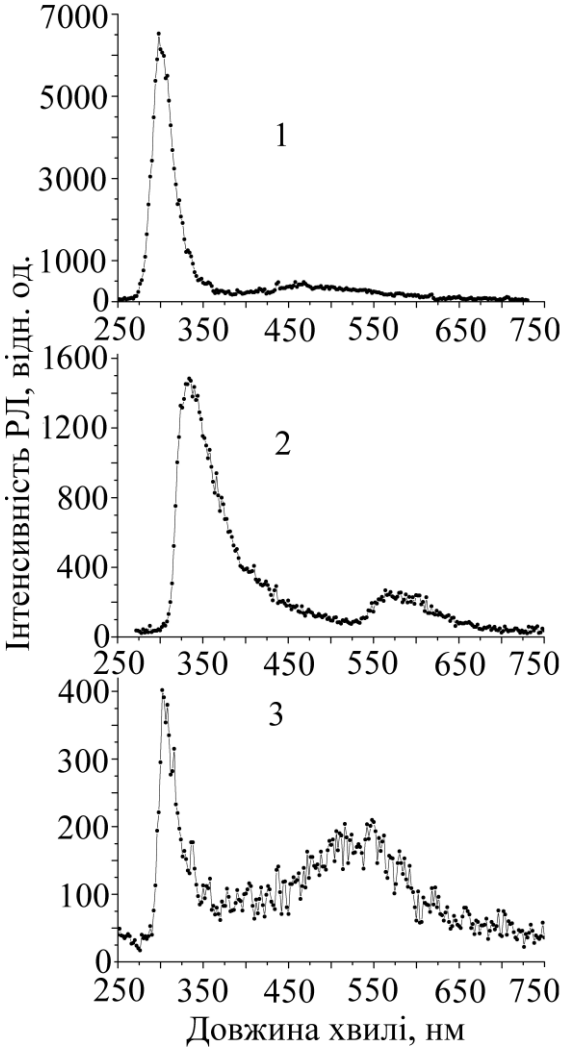


Рис. 1. Спектри РЛ триптофану (1), фенілаланіну (2) та тирозину (3).

Представлено результати перших досліджень люмінесцентних властивостей ароматичних амінокислот (триптофану, тирозину та фенілаланіну) у мікрокристалічному стані під дією рентгенівського випромінювання.

Збудження люмінесценції здійснювалося за допомогою рентгенівської трубки БСВ-21 з кобальтовим антикатодом, що працювала при прискорюючий напрузі 35 кВ і струмі 15 мА. Спектри рентгенолюмінесценції (РЛ) у спектральному діапазоні 200–800 нм вимірювалися за допомогою автоматизованої експериментальної установки на базі монохроматора МДР-23. Як приймач випромінювання використовувався фотоелектронний помножувач ФЭУ-106.

На рис. 1 наведено спектри рентгенолюмінесценції триптофану (1), фенілаланіну (2) та тирозину (3). Добре видно, що всі спектри РЛ характеризуються інтенсивними короткохвильовими (300–400 нм) смугами що є притаманними спектрам УФ-люмінесценції цих молекул і які зумовлені переходами з першого збудженого синглетного рівня на основний синглетний рівень. Однак, на відміну від спектрів УФ-люмінесценції в усіх трьох спектрах РЛ спостерігаються також більш довгохвильові полоси, що розрізняються як за положенням: 580 нм (триптофан), 440 нм (фенілаланін) та 530 нм (тирозин), так і за інтенсивністю. Найбільш інтенсивними є довгохвильові полоси у випадку триптофану і тирозину. При цьому у випадку тирозину довгохвильова полоса за інтенсивністю поступається короткохвильовій усього в два рази, в той час як для триптофану – у 5 разів. Наразі природа цих максимумів є невідомою. На нашу думку, вони пов’язані з фрагментацією досліджених молекул ароматичних амінокислот, яка відбувається під дією високоенергетичних рентгенівських фотонів.

ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ПРИГОТУВАННЯ РЕГУЛЯРНИХ ТА НЕКЛАСИЧНИХ СПЛАВІВ Ar-Kr ПРИ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Н.С.Мисько-Крутік, А.О.Солодовнік

Фізико-технічний інститут низьких температур
ім. Б.І. Вєркіна НАН України, Харків
e-mail: misko@ilt.kharkov.ua

Кріокристали займають важливе місце в фізиці твердого тіла як з точки зору теоретичних, так і прикладних досліджень. Це речовини, які при нормальних умовах знаходяться в газоподібному стані, а в області низьких температур реалізується їх перехід в тверду фазу [1]. Відносна простота кріокристалів дозволяє широко використовувати ці речовини для перевірки різних теоретичних моделей і розрахунків [2]. Розвиток сучасних наукоємних виробництв часто оснований на використанні кріокристалічних досліджень. Інтерес до вивчення бінарних сплавів пов’язаний з тим, що існують ситуації, коли певні властивості та стани можливо реалізувати лише в домішковому стані. Відпрацювання методики приготування регулярних розчинів є визначальним для фундаментальних фізичних досліджень, а особливо теорії розчинів.

У групі простих Ван-дер-Ваальсівських кристалів найбільш вивченими є атомарні кріокристали. Вони утворені атомами інертних газів, які мають заповнені зовнішні оболонки зі сферичною симетрією [3]. Для проведення порівняльного аналізу було обрано атомарно-атомарний сплав аргон-криптон з відносно відомими структурними характеристиками чистих компонент.

Особливі умови було приділено відпрацюванню умов формування регулярних та нерегулярних розчинів. Основним критерієм регулярного розчину є випадковий розподіл компонент [4]. Дослідження проводились на електронографі ЕГ-100А з використанням гелієвого кріостата. Газова суміш чистотою 99,98% при кімнатній температурі змішувалась у спеціальному балоні. Осадження сплаву відбувалось на алюмінієву та зміщену з ним вугільну підкладки при температурах 20 К та 5 К [5]. Для приготування нерегулярного сплаву було змінено процес подачі газової суміші в колону електронографа.

Вперше було проведено порівняльний аналіз приготування регулярних та нерегулярних атомарно-атомарних сплавів Ar-Kr. Полікристалічні зразки формувалися без ознак текстури у всій області взаємних концентрацій. Відпрацювання методики отримання сплавів призвело до формування розчинів

з різними морфологічними характеристиками та періодами їх існування. Досліджено концентраційний інтервал слабких розчинів до 20 мол% домішки з обох боків концентраційної залежності параметра гратки. Експериментально одержані дані було вперше порівняно з теоретичними розрахунками відповідно до правила Вегарда, теорії Пригожина та кластерної моделі.

[1] Б.И. Веркин и А.Ф. Прихотько, Криокристаллы, (Наукова Думка, Киев, (1983).
[2] V.G.Manzhelii, Yu.A.Freiman, Physics of cryocrystals, (New York: AIP Press, (1997).
[3] M.L. Klein and J.A. Venables (eds.), Rare Gas Solids, (Academic Press, London, (1976) Vol. 1; (1977) Vol. 2).
[4] J. H. Hildebrand, R. L. Scott, Regular Solutions, (Hardcover, Import (1962)).
[5] A. Solodovnik, N.S. Mysko-Krutik, Low Temperature Physics 45, 545 (2019).

ЕНЕРГЕТИЧНА ХАРАКТЕРИСТИКА ПЛАЗМОВОГО ПОТОКУ У ПРИСКОРЮВАЧІ З ВІДКРИТИМИ СТІНКАМИ

І.В.Найко, О.А.Гончаров, А.М.Добровольський, В.Ю.Баженов

Інститут фізики НАН України, Київ
e-mail: irynanaiko@gmail.com

На сьогодні всі п’ять типів електрореактивних космічних двигунів - іонні, імпульсні, стаціонарні плазмові двигуни (СПД), прискорювачі з анодним шаром (ПАШ), магніто-плазмові двигуни (МПД) - вже мають певне представлення у формі дослідницьких чи використовуваних моделей. Вже багато років перше місце у виробництві двигунів для космічних апаратів (КА) посідає СПД, який використовувався у більш як 400 КА. Такий успіх СПД зумовлений відносною простотою його конструкції та електричних схем, можливістю отримання високих швидкостей витоку (40–50 км/с), а одним з основних недоліків є ерозія конструктивних частин прискорювача [1, 2].

В Інституті фізики НАН України (м. Київ) було запропоновано новий тип плазмового прискорювача із замкнутим дрейфом електронів і відкритими (газовими) стінками в циліндричній геометрії, який є досить цікавим для генерування потоку заряджених частинок з різною величиною струму і мінімальною ерозією катода. У такому пристрої зменшення вмісту матеріалу стінок в іонному потоці досягається внаслідок мінімізації площі твердотільних стін. Принциповою особливістю даного двигуна є те, що іони сходяться по радіусу системи на вісь, а виходять вздовж неї. Перевагою прискорювача також є збереження динаміки електронів плазмового середовища, оскільки скорочення площі поверхні стінок зводить до мінімуму умови утворення вторинних електронів за рахунок електрон-електронної емісії зі стінок плазмового прискорювача. Робочі режими даного прискорювача дуже близькі до таких у класичного прискорювача з анодним шаром [3].

Метою даного дослідження є вивчення енергії іонів на виході з прискорювача, як характеристики, що однозначно пов’язана з тягою електрореактивного двигуна. Тому вивчення енергії іонів на виході з прискорювача є важливим завданням. Визначення функції розподілу іонів за енергіями в даному прискорювачі проводилось методом затримуючого потенціалу за допомогою 3-х сіткового аналізатора (струм розряду 2–40 мА; напруга 1,5–2,1кВ; тиск в діапазоні 10^{-4} –10^{-3} Торр). Результати досліджень показали формування досить моноенергетичного пучка з розбіжністю енергій на рівні 10% від середнього значення, яке досягало двох третин від величини

анодного потенціалу розряду (зокрема, при *U* аноду = 1,8 кВ, *E* = 1,2 кеВ).

Завдяки цим особливостям прискорювач з відкритими стінками є привабливим для застосування в створенні економічних малих та ефективних ракетних двигунів, різноманітних технологічних застосувань та лінз позитивного просторового заряду для фокусування негативно заряджених пучків.

[1] Physics of Plasmas 27, 120601 (2020).
[2] DM Goebel, I Katz. Fundamentals of electric propulsion: ion and Hall thrusters (John Wiley & Sons, 2008).
[3] Review of Scientific Instruments 87, 02A501 (2016).

PROTON IMAGING WITH PIXEL DETECTOR TIMEPIX3 AT TANDETRON ACCELERATOR

V.Olšanský[1, 3], C.Granja[2], A.Macková[1], C.Oancea[2], V.Havránek[1], D.Chvátil[1], J.Bíla[3]

[1] Nuclear Physics Institute CAS p.r.i., Řež near Prague, Czech Republic
[2]ADVACAM, Prague, Czech Republic
[3] Department of Instrumentation and Control Engineering, Czech Technical University in Prague, Czech republic
e-mail: olsansky@ujf.cas.cz

We examined the application of proton imaging [1] on thin samples at the proton and light-ion Tandetron accelerator [2] of the NPI-CAS in Rez near Prague. We make use of high-sensitivity hybrid semiconductor ASIC pixel detectors Medipix/Timepix equipped with integrated per-pixel signal processing electronics. We use the Timepix3 chip [3] equipped with a 500 µm Si sensor operated with a fast frame rate AdvaPix readout electronics interface.

Measurements were performed in air with a 2.9 MeV proton microbeam on thin samples (< 100 µm thick). Mylar and aluminum foils were variously stacked and used as samples. The samples were placed in front of the detector in orthogonal geometry (beam axis perpendicular to the sensor plane). Measurements were performed with both a focused microbeam (few µm size). The measuring setup is illustrated in Fig. 1.

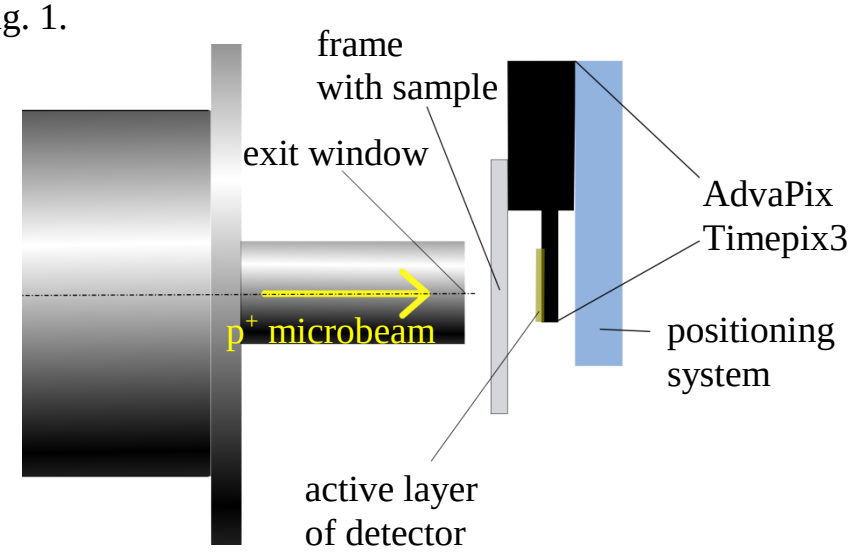


Figure 1. Illustration of measuring setup**:** The proton microbeam goes through the thin sample fixed in front of the detector is behind the sample. The detector with the sample is mounted on a 2D-positioning system.

The imaging principle and source of contrast are based on small changes in the deposited energy of the proton after passing through the sample [4]. These changes can be registered by detailed spectral-tracking analysis of the pixelated clusters in the detector [5]. The track parameters we utilize for imaging contrast are deposited

energy, cluster area (number of pixels) and cluster height (maximum energy value of the pixels in the cluster) [5]. The position of interaction in the detector is registered in sub-pixel resolution [4] down to few μm scale for the particles and geometry used [6]. Radiographies are reconstructed based on these individual parameters imaged in image bins of adjustable size (few μm up to few tens of μm). Results and the sample used are shown in Fig. 2.

Measurements were carried out at the CANAM infrastructure of the NPI CAS Rez supported through MŠMT project No. LM2015056.

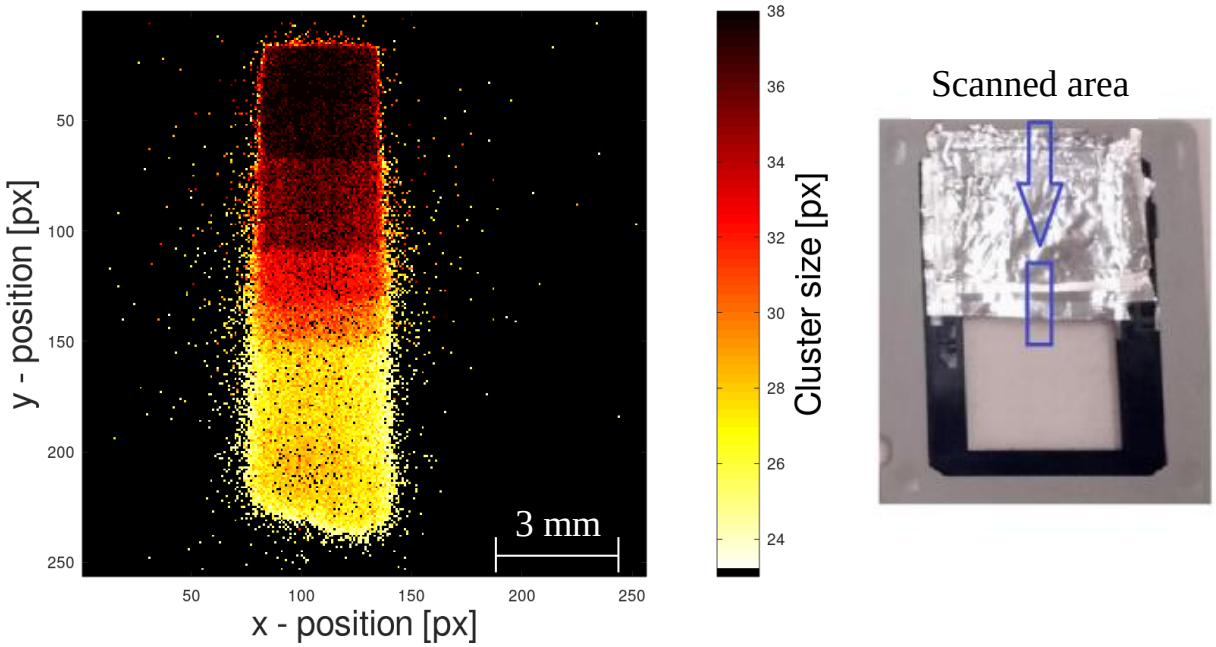


Figure 2. Proton radiograph (left) of a stacked aluminum foil array. The whole detector sensor is shown (256 x 256 pixels = 14 x 14 mm^2). The image is produced by differences in area size of single cluster tracks (values range from 23 to 38 pixels). Photo of the sample assembled from several aluminum foils stacked in stairs geometry (right). The rectangle in blue marks the scanned area (few mm size) for the radiograph shown.

[1] Koehler A.M., Proton radiography, Science, 160, 3825(1968)
[2] Romanenko O., Havranek V., Mackova A, et al., Nuclear Physics Institute in Rez, Rev. Sci. Instrum. 90, 013701 (2019).
[3] Poikela T., Plosila J., Westerlund T., et al., J. of Instrum. 9, C05013 (2014).
[4] J. Jakubek, J. of Instrum. 4, 03013 (2009).
[5] C. Granja, J. Jakubek, S. Polansky, et al., Nuclear Instr. Methods A 908, 60 (2018).
[6] C. Granja, K. Kudela, J. Jakubek, et al., Nuclear Instr. Methods A 911, 142-152 (2018).

He NANODROPLETS AS A UNIQUE QUANTUM CELL FOR FUNDAMENTAL PHYSICS RESEARCH

Y. Ovcharenko

European XFEL GmbH, Schenefeld, Germany
e-mail: yevheniy.ovcharenko@xfel.eu

Helium (He) nanodroplets, commonly called as the "ideal spectroscopic matrix", has been actively studied since their discovery in 1954 [1]. Usually they mostly serve as a cold, weakly perturbing and transparent medium for high-resolution spectroscopy and can be viewed as an isothermal nanoscopic reactor for isolation of single molecules, clusters or even a single reactive encounter at ultralow temperatures [2]. Since one of the unique and useful properties of He nanodroplets is their ability to pick-up atoms or molecules, it allows to study of unique and unperturbed by the environment fundamental processes of doped species. On the other hand, intrinsic quantum properties of pure He nanodroplets still are subject of current research [3]. Thus, when weakly-bound complexes such as He droplets are multiply excited by intense electromagnetic radiation, energy can be exchanged between neighboring atoms through an interatomic Coulombic decay (ICD) [4].

Here we would like to present the ionization dynamics of He nanodroplets irradiated by intense, femtosecond extreme ultraviolet (XUV) pulses, investigated by photo-ion and photoelectron spectroscopies [5-7]. Helium nanodroplets are resonantly excited to atomic-like 2p states with a photon energy of 21.5 eV, below the ionization potential (Ip), and directly into the ionization continuum with 42.8 eV photons. While electron emission following direct ionization above Ip is well explained within a model based on a sequence of direct electron emission events [8], a complex evolution of the electron spectra as a function of droplet size (250 to 10^6 He atoms per droplet) and XUV intensity (10^9–10^{12} Wcm^{-2}) is observed below the ionization potential.

Despite the theoretical predictions in [4], where the main decay channel should proceed via the ICD, the resonant excitation at high power densities provides evidence of a new, collective ionization mechanism (CAI) involving many excited atomic-like 2p states [6]. Additionally, we find that at low and intermediate power densities the resonantly excited He nanodroplets undergo ultrafast relaxation [9,10] and ICD autoionization decay only follows the ultrafast interband electronic transitions. With the help of a numerical simulation based on rate equations we were able to analyze a whole chain of sequential processes including ultrafast electronic relaxation, ICD decay, secondary inelastic collisions, desorption of electronically excited atoms, multi-step ionization and collective autoionization.

We hope that our results provide a detailed understanding of how autoionization of droplets evolves from a regime of low numbers of excitations in the droplets characterized by sharp electron emission lines, to complex autoionization involving many different processes, which eventually results in a cold dense plasma emitting electrons with a broad energy distribution. Additionally, in the agreement with recent theoretical work the novel ionization process, i.e. CAI, is very efficient and it is expected to be important for many other systems. By comparing the experimental results with our simulations, we identify several interesting, fundamental questions which still remain open. Namely, what happens on ultrafast time scales, can we observe the migration or diffusion of excitations? How does a transition from delocalized to localized states take place? How does a network of excitations and subsequent plasma dynamics develop? While these topics need in the first place more detailed theoretical work, from an experimental point of view, performing time resolved measurements to directly access the complete time evolution of the system is highly desirable and will give direct insight into the motion of excitations, such as bubble formation followed by ejection of the excitation out of the droplet or even merging of bubbles [7,10].

Another interesting and unique quantum property of He nanodroplet is his microscopic superfluidity. Due to that fact, a significant fraction of superfluid helium nanodroplets produced in a free-jet expansion can gain high angular momentum resulting in large centrifugal deformation. To study this deformation, we measured single-shot diffraction patterns of individual rotating helium nanodroplets up to large scattering angles using intense extreme ultraviolet light pulses from the FERMI free-electron laser [11]. It has been found, that the shapes of spinning superfluid helium droplets exhibit the same stages as classical rotating droplets while the previously reported metastable, oblate shapes of quantum droplets are not observed. Our three-dimensional analysis represents a valuable landmark for clarifying the interrelation between morphology and superfluidity on the nanometer scale.

[1] E. Whittle, D.A. Dows, G.C. Pimentel, J. Chem. Phys. 22, 1943 (1954).
[2] J.P. Toennies and A.F. Vilesov, Angew. Chem. Int. Ed. 43, 2622 (2004).
[3] M. Mudrich and F. Stienkemeier, Int. Rev. Phys. Chem. 33, 301 (2014).
[4] A.I. Kuleff et al., Phys. Rev. Lett. 105, 043004 (2010).
[5] A. LaForge et al., Sci. Rep. 4, 3621 (2014).
[6] Y. Ovcharenko et al., Phys. Rev. Lett. 112, 073401 (2014).
[7] Y. Ovcharenko et al., New J. Phys. 22, 083043 (2020).
[8] C. Bostedt et al., Phys. Rev. Lett. 100, 133401 (2008).
[9] M. Mudrich et al., Nature Communications 11, 112 (2020).
[10] A. LaForge et al., Phys. Rev. X, in press.
[11] B. Langbehn et al., Phys. Rev. Lett. 121, 255301 (2018).

ВИЗНАЧЕННЯ ІЗОМЕРНОГО ВІДНОШЕННЯ ВИХОДІВ ПРОДУКТІВ ВИСОКОПОРОГОВИХ ФОТОЯДЕРНИХ РЕАКЦІЙ З ЗАРЯДЖЕНОЮ ЧАСТИНКОЮ У ВИХІДНОМУ КАНАЛІ

О.А.Безшийко[1], О.М.Водін[2], Л.О.Голінка-Безшийко[1], І.М.Каденко[1], К.О.Крячок[1], В.А.Кушнір[2], В.В.Мітроченко[2], С.М.Олійник[2], П.В.Палінічак, С.А.Пережогін[2], C.Vallerand[3]

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ
[2]НДК "Прискорювач" ННЦ ХФТІ НАН України, Харків
[3]Laboratoire de l'Accélérateur Linéaire (LAL), Orsay, France
e-mail: lyalkagb@gmail.com

Гамма-промені є зручним інструментом для дослідження різних процесів у ядерній фізиці. Фотони з енергіями в десятки МеВ вносять відносно невеликі зміни в ядра (порівняно з зарядженими та масивними частинками) і можуть використовуватися для отримання інформації про нуклон-нуклонну взаємодію, колективний рух ядерної речовини (гігантський дипольний резонанс), механізми збудження ядерного стану, тощо.

Ізомерні відношення – це відношення виходів реакцій утворення кінцевого ядра в ізомерному та основному стані. Ці відношення залежать від спіну ядра мішені та введеного кутового моменту.

Ізомерні відношення у фотоядерних реакціях були досить повно досліджені для реакцій (γ, n) та $(\gamma, \gamma`)$, тоді як $(\gamma, xnxp)$ реакції вивчені набагато менш ретельно. Вивчення ізомерних співвідношень у реакціях з викидом заряджених частинок представляє інтерес через їх суттєву відмінність від (γ, n) реакцій: такими реакціями збуджуються інші стани, які є часто неможливими у (γ, n) каналі.

Головною метою даної роботи є визначення ізомерних відношень виходів продуктів високопорогових фотоядерних реакцій з зарядженою частинкою у вихідному каналі.

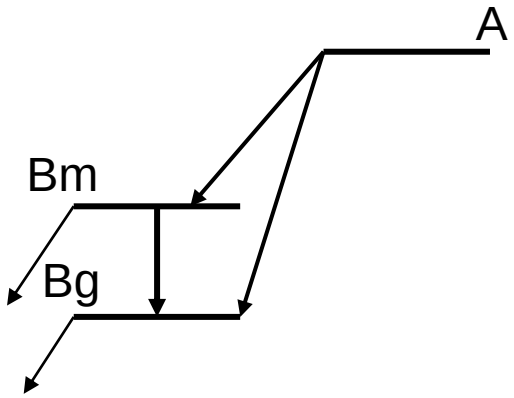


Рис.1. Схема розпаду з додатковим внеском ядра попередника.

Паралельно з $(\gamma, xnxp)$ реакціями відбуваються реакції (γ, xn), які знаходяться в ізобарному ланцюжку розпаду вище реакцій з вильотом зарядженої частинки (наприклад, реакція $(\gamma, 2n)$ вище реакції (γ, np)). Продукти цих фотонейтронних реакцій продовжують насичувати рівні досліджуваного ядра (з зарядженою частинкою у вихідному каналі) після закінчення опромінення.

Для коректного експериментального визначення ізомерного відношення виходів важливо врахувати заважаючий внесок таких фотонейтронних реакцій. У випадку утворення ізомерної пари Bm Bg та ядра попередника A, яке може насичувати при своєму розпаді ізомерні рівні ядра B (див. Рис.1) можна скласти наступну систему диференційних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dN_A(t)}{dt} = Y_A(t) - \lambda_A N_A(t) \\ \frac{dN_{Bm}(t)}{dt} = Y_{Bm}(t) - \lambda_{Bm} N_{Bm}(t) + p_{ABm}\lambda_A N_A(t) \\ \frac{dN_{Bg}(t)}{dt} = Y_{Bg}(t) - \lambda_{Bg} N_{Bg}(t) + p_{BmBg}\lambda_{Bm} N_{Bm}(t) + p_{ABg}\lambda_A N_A(t) \end{cases},$$

де N_A, – заселеність основного рівня ядра-попередника, що в ланцюжку бета-розпаду є материнським ядром для досліджуваної ізомерної пари, Y_A – вихід реакції з утворенням цього ядра, λ_A - стала розпаду ядра-попередника, N_{Bi}, *i=g(m)* – заселеність основного (метастабільного) рівня ядра, що вивчається, Y_{Bi}, *i=g(m)* – вихід реакції з утворенням ядра, що досліджується, $\lambda_{Bm}(\lambda_{Bg})$ - сталі розпаду метастабільного (основного) стану ядра, що вивчається, p_i*(i=ABm, ABg, BmBg)* - коефіцієнт розгалуження (відношення імовірності розпаду на ізомерний (основний) стани досліджуваного ядра до повного розпаду ядра-попередника, або відношення імовірності переходу з ізомерного стану на основний до повної імовірності розпаду ізомерного стану досліджуваного ядра).

У даній роботі проведено аналітичний розв’язок даної системи рівнянь та написано код для розрахунку ізомерного відношення з врахуванням внеску ядра-попередника.

Наукова робота авторів з Київського національного університету імені Тараса Шевченка і LAL проводилося в рамках міжнародної асоційованої лабораторії LIA IDEATE.

AN INVESTIGATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF NITROGEN CONTAINING HETEROCYCLES BY SYNCHROTRON-BASED SPECTROSCOPIC TECHNIQUES

O.Plekan[1], C.Callegari[1], M.Di Fraia[1], K.C.Prince[1], R.Richter[1], H.Sa'adeh[2], A.Ciavardini[3], M.Devetta[4], D.Facciàlà[4], C.Vozzi[4], L.Avaldi[5], P.Bolognesi[5], M.C.Castrovilli[5], D.Catone[6], M.Coreno[6], E.Bernes[7], G.Fronzoni[7], D.Toffoli[7], and A.Ponzi[8]

[1]Elettra Sincrotrone Trieste, Area Science Park, Basovizza, Trieste, Italy,
[2]Department of Physics, The University of Jordan, Amman, Jordan,
[3]University of Nova Gorica, Ajdovščina, Slovenia,
[4]CNR-Istituto di Fotonica e Nanotecnologie, (CNR-IFN), Milano, Italy,
[5]CNR-Istituto di Struttura della Materia (CNR-ISM), Monterotondo Scalo, Italy,
[6]CNR-Istituto di Struttura Della Materia (CNR-ISM), Rome, Italy,
[7]Dipartimento di Scienze Chimiche, Università degli Studi di Trieste, Trieste, Italy,
[8]Institut Ruđer Bošković, Zagreb, Croatia.
e-mail: oksana.plekan@elettra.eu

Heterocycles such as indoles represent a very important class of compounds. Indole (I), 2,3-dihydro-7-azaindole (7-AI) and 3-formylindole (3-FI) (see Fig.1) are prevalent substructures in naturally occurring and synthetic molecules playing key roles in biology, chemistry and medicine [1]. Indole derivatives possess unique biological characteristics such as: antioxidant, anticancer, antibacterial, antifungal, anti-inflammatory, antiviral, anticonvulsant and antihypertensive properties, among other applications. In addition, indole-based chromophores form the basic building block units of the eumelanin pigments that occur frequently in nature and serve to protect organisms from the potentially damaging effects of UV light [2]. 7-AI, whose molecular structure is shown in Fig. 1(b), has received considerable attention since the corresponding dimer has been recognized as a simple model for the hydrogen-bonded base pairs of DNA and could provide information on the possible role of tautomerism in mutation [3]. 3-formylindole is a heteroarenecarbaldehyde, that is, the hydrogen at position 3 of indole has been replaced by a formyl group (see Fig. 1(c)), and is known as a biologically active metabolite [4].

Because of their rich chemistry and biological activity, indoles have been extensively studied using various spectroscopies. Experimental studies of electronic properties of indole and its derivatives have employed optical (including vibrationally and rotationally resolved) methods [5] as well as time-resolved ion and photoelectron spectroscopy [6]. However, it appears that up to now experimental evidence concerning the full electronic structure of these biomolecules under isolated conditions is still limited. Since nitrogen containing heterocycles have been identified as an important probe for studying protein interaction, and since little is known about

their electronic structure in the ground state, information about inner-valence, core level as well as unoccupied states becomes crucial.

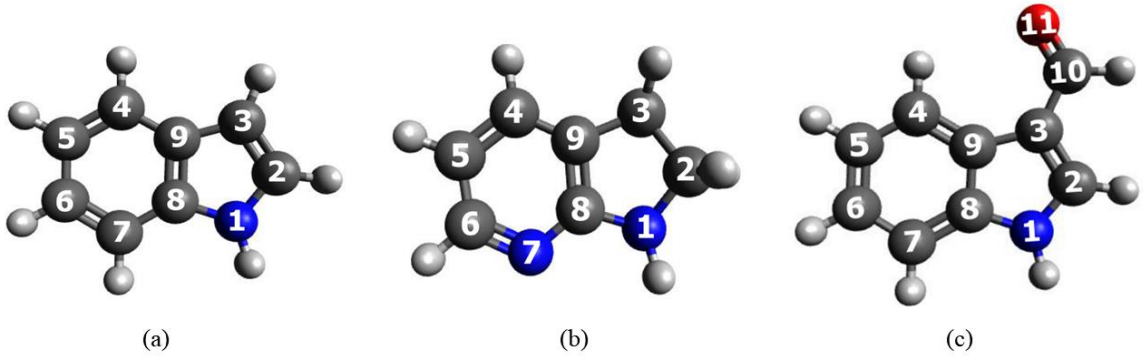


Fig. 1. Schematic chemical structures of the investigated indoles: (a) indole, (b) 2,3-dihydro-7-azaindole (7-AI), and (c) 3-formylindole (3-FI). The C (black), N (blue) and O (red) atoms are labelled.

The present work provides a comprehensive electronic structure analysis for two indole derivatives - in direct comparison to the parent indole – based on synchrotron radiation spectroscopic techniques. Valence band (VB) spectroscopy allows us to experimentally determine the ionization energies of molecules that can be correlated to the energies of occupied molecular orbitals. X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) provides localized ionization of a specific atom, and chemical information about that atom. Near edge X-ray absorption fine structure (NEXAFS) spectroscopy is an ideal method to probe the electronic properties of materials through the absorption fine structure in the spectra which corresponds to transitions from core orbitals to unoccupied orbitals. In addition, all experimental data have been interpreted by density functional theory (DFT) calculations [7, 8].

[1] R. J. Sundberg, The Chemistry of Indoles (Academic Press, New York, 1996).
[2] P. Meredith, T. Sarna. Pigment Cell Res., 19, 572 (2006).
[3] K. Fuke, H. Yoshiuchi, K. Kaya. J. Phys. Chem., 88, 5840 (1984).
[4] L.S. Zhang, S.S. Davies. Genome Medicine. 8, 1 (2016).
[5] L. A Philips, D. H. Levy. J. Chem. Phys., 85, 1327 (1986).
[6] T. J. Godfrey, H. Yu, S. Ullrich. J. Chem. Phys., 141, 044314 (2014).
[7] O. Plekan et al. J. Phys. Chem. A. 124, 4115 (2020).
[8] A. Ponzi et al. Submitted to the JPC (2021).

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ОПРОМІНЕННЯ ЕЛЕКТРОННИМИ ПУЧКАМИ НА ПОКАЗИ МІДЬ-КОНСТАНТАНОВОЇ ТЕРМОПАРИ

І.Г.Мегела, О.М.Поп

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: oksana_pop@i.ua

У зв'язку з великою щільністю потоку електронів на виході мікротрона М-30 виникає потреба контролю температури зразків та забезпечення необхідного її значення під час опромінення. З цією метою можуть використовуватися термопари. Зазвичай, при роботі на мікротроні М-30 важливим є вимірювання температури в діапазоні 77-400 К. Для цього інтервалу температур зручною є мідь-константанова термопара. Важливим є дослідити можливий вплив опромінення на характеристики мідь-константанової термопари.

З цією метою досліджувалась диференціальна мідь-константанова термопара після довготривалого застосування її для вимірів температури зразків у процесі опромінення при різних температурах. Мідь-константанова термопара була опромінена інтегральними потоками $5\cdot10^{18}$ ел.·см$^{-2}$ та $1\cdot10^{19}$ ел.·см$^{-2}$. Після чого проведені калібрування значень її термо-е.р.с. по точкам, табл.1, кипіння азоту (77 К), плавлення льоду (273 К) та кипіння води (373 К) (стовпчик 2), після опромінення інтегральним потоком 5 10^{18} ел. см$^{-2}$ (стовпчик 3) та після опромінення інтегральним потоком 1 10^{19} ел. см$^{-2}$ (стовпчик 4). В стовпчику 1 приведено стандартні значення цих показів [1]. Виміри здійснювались відносно температури кипіння азоту.

Таблиця 1

Вплив опромінення електронами на показники мідь-константанової термопари

Температура, К	Вплив термо – е.р.с., мВ			
	1	2	3	4
77	0,0000	0,002	0,001	0,002
273	5,4746	5,489	5,472	5,482
373	9,7506	9,772	9,763	9,768

Як видно з наведених результатів, в межах похибки вплив опромінення на покази мідь-константанової термопари не спостерігається, що підтверджує обґрунтованість її використання для контролю температури при опроміненні.

[1] Г.В. Самсонов, А.И. Киц, О.А. Кюздени, В.И. Лах, И.Ф. Паляныця, Б.И. Стаднык (К.: Изд. "Наукова думка", 1972).

АСИМПТОТИЧНА ТЕОРІЯ ЗАРЯДОВОГО ОБМІНУ МІЖ ДИПОЛЬНО-ЗВ'ЯЗАНИМИ АНІОНАМИ ТА ПОЛЯРНИМИ МОЛЕКУЛАМИ

В.Р.Євич, М.В.Поп, М.Я.Євич, М.І.Карбованець

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: m.karbovanets@gmail.com

Дипольно-зв'язані аніони (ДЗА), тобто від'ємні молекулярні іони, в яких надлишковий електрон зв'язаний з нейтральною молекулою завдяки її власному дипольному моменту, впродовж останніх років становлять значний інтерес як для експериментаторів, так і для теоретиків [1-3]. Зовнішній слабко зв'язаний електрон у ДЗА утримується на дифузній орбіталі великої протяжності (десятки ангстрем) з малою енергією зв'язку (десятки меВ), внаслідок чого ДЗА проявляють високу активність у різноманітних реакціях, зокрема, зарядово-обмінних. У даній роботі в межах квазікласичного варіанту асимптотичної теорії [2] досліджено низькоенергетичну одноелектронну перезарядку ДЗА A^- на полярній молекулі B виду:

$$A^- + B \to A + B^- . \qquad (1)$$

Одноелектронну обмінну взаємодію, яка визначає процес (1), обчислено методом поверхневих інтегралів [2]. Для знаходження правильних асимптотик хвильових функцій квазімолекули $(AB)^-$ використано метод ВКБ, а полярні молекули та ДЗА розглядаються в моделі точкового диполя.

Одержано аналітичне представлення для потенціалу одноелектронної обмінної взаємодії полярної молекули з ДЗА з урахуванням взаємної орієнтації молекулярних залишків. У межах концепції "динамічного" потенціалу обмінної взаємодії враховано ефекти переносу імпульсу електрона у реакції (1), які стають особливо відчутними при швидкостях зіткнення $\upsilon \geq 1$ а.о.

Обчислено перерізи одноелектронної перезарядки ДЗА ацетонітрилу CH_3CN^- на полярній молекулі нітрометану CH_3NO_2:

$$CH_3CN^- + CH_3NO_2 \to CH_3CN + CH_3NO_2^- \qquad (2)$$

з врахуванням обертальних станів молекулярних залишків. Розраховані нами перерізи процесу (2) задовільно узгоджуються з експериментальними даними [1].

Досліджено можливість утворення димерів у дипольно-зв'язаних аніонах.

[1] Y. Liu, M. Cannon, L. Suess, F.B. Dunning, V.E. Chernov, B.A. Zon, Chem.Phys.Lett. 433, 1 (2006).
[2] О.М. Карбованець, М.І. Карбованець, В.Ю. Лазур, М.В. Хома, Наук. вісн. Ужг. ун-ту. Серія Фізика 25, 115 (2009).
[3] V.E. Chernov, A.D. Danilyan, B.A. Zon, Phys.Rev. A 80, 022702 (2009).

СИМУЛЯЦІЯ ПАРАМЕТРІВ ПУЧКІВ ГАЛЬМІВНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ ПРИ ВЗАЄМОДІЇ ЕЛЕКТРОНІВ З ТАНТАЛОВИМ КОНВЕРТЕРОМ НА МІКРОТРОНІ М-30

І.В.Пилипчинець, Є.В.Олейніков, О.О.Парлаг, О.І.Лендєл

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: igor.profi@gmail.com

Для вивчення характеристик фотоядерних реакцій (фотоподілу ядер актинідів) та при проведенні прикладних досліджень (ізотопний і кількісний аналіз ядерних матеріалів, радіоактивних відходів) широко використовуються пучки гальмівного випромінювання, які отримуються при взаємодії електронів із конвертерами (радіаторами, гальмівними мішенями), виготовленими з тугоплавких металів, на електронних прискорювачах.

Як матеріал для виготовлення конвертерів широко використовується тантал (Та) завдяки своїм фізико-технічним і радіаційним властивостям [1]. Вихід гальмівного випромінювання при взаємодії високоенергетичних пучків електронів з Та-конвертерами, в першу чергу, буде залежати від енергії електронів та товщини Та-радіаторів. Вихід гальмівного випромінювання при взаємодії високоенергетичних пучків електронів з Та-конвертерами передусім залежать від енергії електронів та товщини Та-радіаторів.

В результаті експериментальних досліджень та теоретичних розрахунків встановлено, що максимум ефективності виходу гальмівного випромінювання з Та-конвертерів досягається при їх товщині, яка становить $\sim 0.4 \div 0.5$ пробігу електронів для фіксованих значень енергії [1]. Тому, пучок гальмівного випромінювання, окрім високоенергетичних фотонів, буде містити залишкові електрони, що необхідно враховувати при плануванні активаційних експериментів на електронних прискорювачах. Вторинні електрони при взаємодії з досліджуваними зразками (особливо це стосується ядер актинідів) можуть ініціювати електронно-ядерні реакції (e^-,f)-, та додатково генерувати в них гальмівні фотони (e,γ)- та фотонейтрони (e,n)-. Їх внесок може суттєво впливати на точність отриманих експериментальних даних.

Існує обмежена кількість робіт, присвячених експериментальному вивченню трансмісії (поглинанню) високоенергетичних електронів Та-радіаторами (пластинами): область енергій $4 \div 12$ МеВ (товщина $0.018 \div 3.6$ см) [2] та область енергій $6.5 \div 17.75$ МеВ (товщина – $0.01 \div 0.1$ см) [1]. Слід зазначити, що на коефіцієнти трансмісії (поглинання) електронів Та-радіаторами, окрім їх енергії, впливатиме ряд факторів [3,4]: форма (розміри) джерела електронів, Та-мішені й детектори електронів; відстані між джерелом електронів і Та-радіатором та Та-радіатором і детектором; а також фізичні властивості детектора.

Тому вирішення задачі прогнозування параметрів (співвідношення високоенергетичних фотонів та залишкових електронів) пучків гальмівного

випромінювання, які взаємодіють з досліджуваними мішенями, є надзвичайно актуальне.

У роботі представлені результати розрахунків параметрів пучків гальмівного випромінювання, отриманих при взаємодії електронів (E_e = 12.5 МеВ) з Та-конвертерами (товщиною – 0.01 ÷ 0.1 см) для реальних умов проведення експериментальних досліджень на електронному прискорювачі – мікротроні М-30. Для симуляції використовувався розрахунковий код GEANT4 10.7 [5]. Моделювання проводилося для різних типів вихідного пучка електронів, а саме, “pensil beem” та “paralel beem” з нормальним і рівно-імовірним виходом електронів та отримані наступні результати:

- енергетичні спектри фотонів (γ/e) і вторинних електронів (e/e) в залежності від товщини Т-конвертера та відстані до детектора (0 ÷ 200 мм). Детектор – імітатор циліндру Фарадея (матеріал – мідь, довжина – 120 мм, діаметр – 50 мм) використовувався для збору електронів та фотонів. Додатково фотони збиралися детекторами з золота, які мали форму дисків зі змінними радіусами (10 ÷ 50 мм) та товщиною (0.1 ÷ 1 мм);
- залежність сумарних виходів фотонів та вторинних електронів від товщини Та-радіатора і відстані до площини розташування детекторів;
- співвідношення між енергетичними спектрами та сумарними виходами фотонів і вторинних електронів (Та-радіатор, товщина – 1 мм) зібраних детекторами подільних матеріалів (Th, U, Pu), які мали форму дисків (радіус – 10 мм, товщина від 0.1 до 1 мм);
- залежності коефіцієнтів трансмісії електронів від товщини Та-мішені при фіксованих відстанях Та-мішень – детектор-імітатор циліндру Фарадея.

Також розраховані:

- залежності виходів фотонів від товщини Та-мішеней узгоджуються з існуючими експериментальними даними [6] та результатами симуляції MCNP кодом [7];
- чисельні значення залежності коефіцієнтів трансмісії електронів від товщини Та-радіаторів при фіксованих відстанях: Та-мішень – детектор-імітатор циліндра Фарадея узгоджуються з експериментальними даними, отриманими на електронному прискорювачі – мікротроні М-30 [1].

Результати розрахунків дозволяють оптимізувати експериментальні схеми досліджень характеристик фотоподілу ядер актинідів та схеми проведення прикладних робіт по ізотопному і кількісному аналізу ядерних матеріалів на електронному прискорювачі – мікротроні М-30.

[1] І.В. Пилипчинець та ін., НВУжУ, сер. Фізика 45, 50 (2019).
[2] P. J. Ebert et al. Phys. Rev. 183, 422 (1969).
[3] R.K. Batra et al. J. Radial. Appl. Instrum. 4, 413 (1992).
[4] S. Yalçın et al. J. Radioanal. Nucl. Chem. 266, 509 (2005).
[5] GEANT4 10.7 (4 December 2020).
[6] V.P. Kovalev et al. At Energy. 31, 1028 (1971).
[7] Hai-Bo Xu et al. Chin. Phys. B. 19, 062901 (2010).

X-RAY LUMINESCENCE SPECTRA OF UNDOPED Ga_2O_3 CRYSTAL

M.Rudko[1], V.Kapustianyk[1], V.Mykhailyk[2]

[1]*Ivan Franko Lviv National University, Lviv*
[2]*Diamond Light Source, Harwell Campus, Didcot, UK*
e-mail: rudko_mykola@ukr.net

Recently, the scintillation properties of undoped Ga_2O_3 have been examined for the first time, and it was shown that the material is a promising scintillator, exhibiting a light yield of 15000 ph/MeV and a decay time constant of 8 ns at room temperature [1]. This triggered further investigations of the material scintillation properties.

In this work, we report the results of studies of X-ray luminescence of undoped Ga_2O_3 crystal as a function of temperature. By exploring and analyzing the temperature dependence of these properties, we extended our knowledge of the material and assessed the prospect of Ga_2O_3 for application as cryogenic scintillation detector.

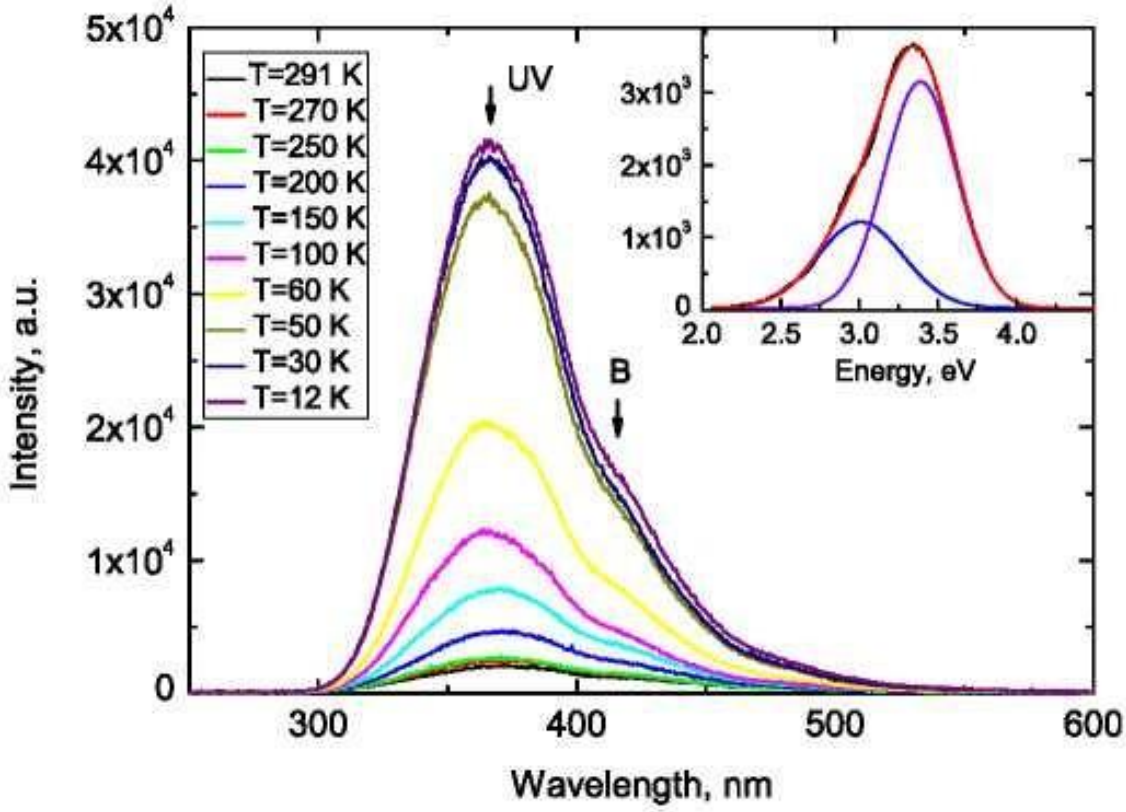


Fig. X-ray luminescence spectra of Ga_2O_3 measured at different temperatures. Two emission bands are marked as UV and B. The inset shows the emission spectrum at T=12 K as a function of energy, decomposed into two Gaussians peaking at 3.01 eV (blue emission) and 3.38 eV (UV emission), respectively

Under steady-state X-ray excitation, Ga_2O_3 exhibits a broad emission band in the UV-green region of emission spectrum that gradually increases in intensity with cooling the crystal (see Fig.). The emission band peaking at 380 nm has a complex character, which is a characteristic for a system where transitions occur within different emission centers. This is demonstrated in the inset of Figure 1, where the emission spectrum measured at a temperature of 12 K is plotted as a function of photon energy.

The spectrum can be represented as a sum of two Gaussians at 3.01 and 3.38 eV, indicating that at least two types of emission centers exist in the crystal under study. Such a composite structure of luminescence spectra is a characteristic feature of gallium oxide. Previous studies of luminescence properties of undoped Ga_2O_3 reported at least three strongly overlapping emission bands in UV, blue, and green parts of the emission spectra [2–5]. The UV band is generally independent of specific impurities and thus is assigned to the emission of self-trapped excitons. This emission typically manifests fast kinetics in the nanosecond range. The blue and green bands are attributed to transitions involving deep donors and acceptors. Electrons recombining with holes at the defect sites are the origin of recombination luminescence with long decay kinetics (microsecond range). The formation energy of different types of intrinsic defects in β-Ga_2O_3 was analyzed in a recent theoretical work [6]. The results of that study confirmed that blue emission is due to complexes of oxygen and gallium vacancies (V_O+V_{Ga}).

Acknowledgement

This work was supported by National Research Foundation of Ukraine in the framework of the project: “Multifunctional organic-inorganic magnetoelectric, photovoltaic and scintillation materials” (Reg. No 2020.02/0130).

[1] T. Yanagida, G. Okada, T. Kato, D. Nakauchi, and S. Yanagida. Appl. Phys. Express 9, 042601 (2016).
[2] G. Blasse and A. Brill. J. Phys. Chem. Solids 31, 707 (1970).
[3] V. I. Vasil’tsiv, Y. M. Zakharko, and Y. I. Rym. Ukrainskyi Fizychnyi Zh. 33, 1320 (1988).
[4] L. Binet and J. Gourier. J. Phys. Chem. Solids 59, 1241 (1998).
[5] T. Onuma, S. Fujioka, T. Yamaguchi, M. Higashiwaki, K. Sasaki, T. Masui, and T. Honda. Appl. Phys. Lett. 103, 041910 (2013).
[6] Q. D. Ho, T. Frauenheim, and P. Deak. Phys. Rev. B 97, 115163 (2018).

THERMOACTIVATED HEAT TRANSFER MECHANISM IN DYNAMICALLY ORIENTATIONALLY DISORDERED (DOD) PHASE OF 1,1-DIFLUOROETHANE

V.V.Sagan, V.A.Konstantinov, A.I.Krivchikov, A.V.Karachevtseva

B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkiv
e-mail: sagan@ilt.kharkov.ua

In the present work we have studied the mechanism leading to an increase in thermal conductivity with growing temperature in the DOD phases of molecular crystals. As the subject of our study chose 1,1-difluoroethane (the purity of R152a freon was not worse than 99%). Analysis of the experimental results showed that the thermal conductivity increased with temperature, similar to how it occurs in amorphous and glass-like substances above the plateau area.

Earlier, the increase in isochoric thermal conductivity with growing temperature in the DOD phases of molecular crystals was qualitatively explained by a decrease in the probability of scattering of acoustic phonons on collective rotational excitations due to weakening of interaction between translational and orientational subsystems [1].

A new mechanism for describing the behavior of heat transfer is proposed, where an increase in thermal conductivity with temperature is associated with thermally activated hopping of localized excitations. It was shown that an additional contribution to thermal conductivity can be described using the Arrhenius expression [2]:

$$k_{TA}(T) = k_0 \cdot exp(-E / kT),$$

where E is the activation energy in kelvins; κ_0 – pre-exponential factor, k – Boltzmann constant.

The findings give clear evidence that the previously proposed mechanism, related to the disinhibition of the rotational motion of molecules and a decrease in phonon scattering is not completely coherent with the experimental facts observed. It is shown that the increase in thermal conductivity with growing temperature can be described by the hopping thermal activation mechanism, with constant activation energy and a pre-exponential factor depending on the density.

[1] V.A. Konstantinov, Heat Transfer - Theoretical Analysis, Experimental Investigations and Industrial Systems, InTech Open Access Publisher 157 (2011).
[2] A. Jezowski, M. A. Strzhemechny, A. I. Krivchikov, O. S. Pyshkin, O. O. Romantsova, O. A. Korolyuk, D. I. Zloba, Yu. V. Horbatenko, A. Filatova, AIP Advances, 9, 015121 (2019).

ЛЮМІНЕСЦЕНЦІЯ МОЛЕКУЛ ЦИТОЗИНУ ПРИ РІЗНИХ СПОСОБАХ ЗБУДЖЕННЯ

В.Ю.Шпеник, М.І.Шафраньош, Б.М.Маргітич, М.І.Суховія, Ш.Б.Молнар, О.О.Шпеник, І.І.Шафраньош

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: shpenik@hotmail.com

Люмінесценція водних розчинів цитозину при кімнатній температурі досліджувалася в роботах [1, 2]. У роботі [3] явище люмінесценції досліджували при УФ опромінюванні розчину цитозину, який заморожувався до температури рідкого азоту. Розчинниками служили пропіленгліколь та/або пропіленгліколь з водою у співвідношенні 1:1. При порівнянні результатів роботи [1] з результатами авторів [2,3] спостерігається розбіжність максимумів довжин хвиль у спектрах. Ці розбіжності можуть бути пов’язані з труднощами реєстрації слабкої емісії випромінювання сполук, недостатнім ступенем чистоти препаратів та впливом розчинника.

У даному повідомленні йдеться про виявлення у нейтральному водному середовищі фотолюмінесценції цитозину та її порівняння з даними робіт [1-3] і з люмінесценцією цієї азотистої основи у газовій фазі та у вигляді плівок під дією пучка електронів [4, 5].

Фотолюмінесценція вивчалася за допомогою спектрофлуориметра RF-6000 виробництва компанії Shimadzu. Висока чутливість цього приладу дозволила встановити нові, раніше невідомі, особливості люмінесценції цитозину. Досліджуваний розчин готувався на основі дистиляту води та препарату цитозину, виготовленого фірмою Sigma-Aldrich (чистота 99 %). Збудження фотолюмінесценції відбувалося під дією випромінювання ксенонової лампи на довжині хвилі 275 нм та за одночасної дії лазерного променя з довжиною хвилі 530 нм, що було проведено вперше. Максимум люмінесценції розчину цитозину спостерігався в області 360–380 нм. Важливим результатом виконаного експерименту є виявлення синергетичного впливу лазерного випромінювання, що свідчить про особливості трансформації енергії збудженої молекули цитозину.

[1] H.C. Borresen, Acta Chemica Scandinavica 17, 921 (1963).
[2] S. Udenfriend, P. Zaltman, Analytical biochemistry 3, 49 (1962).
[3] J.W. Longworth, R.O. Rahn, R.G. Shulman, J. Chem. Phy. 45, №8, 2930 (1966).
[4] М.И. Суховия, В.Н. Славик, И.И. Шафраньош, Л.Л. Шимон, Биополимеры и клетка 7, 77 (1991).
[5] I. Shafranyosh, M. Zapatokova, M. Sukhoviya, I. Shafranyosh, and Yu. Svida, Journal of Applied Spectroscopy 87, 256 (2020).

ДОСЛІДЖЕННЯ ХІМІКО-ФІЗИЧНИХ ТА БІОЛОГІЧНИХ ЕВОЛЮЦІЙНИХ ЗМІН ПОКАЗНИКІВ ВОДИ ТА РОЗЧИНІВ ГЛЮКОЗИ/САХАРОЗИ, ОПРОМІНЕНОЇ НА МІКРОТРОНІ М-30 З ЕНЕРГІЄЮ 12,5 МЕВ

Н.І.Сватюк[1], Н.В.Бойко[2],О.І.Симканич[2], С.А.Тимощук, О.М.Поп[1], О.М.Турховський[1], О.А.Тарнай[1], О.О.Грабар[2], В.Т.Маслюк[1]

[1]Інститут електронної фізики Національної академії наук України, Ужгород
[2]ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: svatiuk@nas.gov.ua

Відомою є актуальність вивчення характеристик води і водних розчинів органічних сполуку без та в умовах дії зовнішніх факторів, враховуючи їх фундаментальну роль у житті біоти. Такі дані є важливими для прикладних застосувань, де вода служить робочою субстанцією, чи медіатором технологічних процесів. Навіть попри позірну простоту хімічного складу води, питання її будови, лабільності структурних одиниць є предметом постійних дискусій [1]. Радіаційна хімія води та водних розчинів відкриває ще один напрямок досліджень, пов’язаних із реалізацією екзотичних хімічних реакцій, формуванням нових хіміко-структурних комплексів та вивченням їх біологічної активності [2].

Продукти радіолізу води мають непрямий вплив на структуру ДНК у живих організмах, які є співставними з їх радіаційною деструкцією. Враховуючи, що наземна радіація є постійним чинником існування біоти, вивчення кінетики та особливості хіміко-структурних перетворень для води, водних розчинів та їх вплив на метаболізми живих організмів є також важливим.

Дана робота представляє результати комплексних фізико-хімічних та біологічних досліджень характеристик і кінетики радіолізу води, розчинів глюкози та сахарози, опромінених на мікротроні М-30 (12,5 МеВ, 1 MRad). Предметом вивчення була часова еволюція цих характеристик на прикладі зразків рідин (розчинів) з різним вмістом органічної компоненти. Вибрані об’єкти дослідження вода та глюкоза/сахароза мають хімічну структуру, елементи якої мають різну чутливість до дії радіаційних факторів та широко використовуються в медицині та харчовій промисловості.

Результати дослідження демонструють різний характер зміни фізико-хімічних (оптичних, електрофізичних та лужно/кислотних) параметрів дистильованої води та водних розчинів глюкози/сахарози. Це проявляється у них різними ступенями ефектів радіаційного пошкодження та здатності відновлювати свої характеристики з часом. Новим є встановлення ефектів радіаційного просвітлення/затемнення оптичних характеристик досліджуваних матеріалів. Залежно від режимів опромінення експеримент демонструє різну динаміку часових змін pH, провідності та біологічної активності отриманих водних розчинів.

Запропоновано модель для пояснення отриманих результатів: високоенергетичне ядерне опромінювання в умовах даного експерименту створює з вихідних органічних матеріалів масиви елементарних структурних сегментів різної природи та хімічного складу, релаксація яких проходить різними каналами. Кінцевий стан містить набір метастабільних конфігурацій, переходи можуть бути стимульовані температурою та радіацією. Ситуація схожа з грою Лего [3], коли перебір різних комбінацій вихідних сегментів дозволяє створювати нові просторові структури. Це відкриває можливості направленої зміни характеристик водних розчинів органічних матеріалів, що важливо для фармації.

Встановлені біологічні характеристики опромінених зразків води та розчинів глюкози/сахарози свідчать про наявність вибіркової дії на тест-мікроорганізми з різних філогенетичних груп. Біологічну активність вказаних розчинів оцінювали за наявністю у них антибактеріальної чи стимулюючої дії стосовно вибраних тест-мікроорганізмів: *Staphylococcus aureus, Escherichia coli* та *Pseudomonas aeruginosa.* які є неспоровими умовно-патогенними бактеріями і відрізняються за своєю філогенетичною належністю і патогенністю [3]. Біологічні ефекти, або антибактеріальна дія опромінених зразків, суттєво відрізняються за спрямованістю і впливом на певний вид тестованого мікроорганізму. Має місце вплив як способу підготовки розчинів глюкози/сахарози, так і умови його опромінення: доза, сорт ядерних частинок та щільність потоку. Вперше отримано результати досліджень часової еволюції фізико-хімічних та біологічних характеристик протягом часу «охолодження» опромінених розчинів. Результати досліджень важливі для розробки нових біомедичних технологій експрес-реакцій загроз вірусних пандемій. Експерименти подібного роду проводились вперше, тому вони мають велике наукове та практичне значення як у прикладних науках, так і в медицині в цілому.

[1] A. Myalitsin, S. Ghosh, S. Urashima, S. Nihonyanagi, S. Yamaguchi, T. Aoki and T. Tahara, Phys. Chem. Chem. Phys. 22, 16527 (2020).
[2] Y. Muroya Radiation Chemistry of Water and Aqueous Solutions, 66, 425 (2017).
[3] O.I. Symkanych, V.T. Maslyuk, N.V. Boyko., S.A. Tymoshchuk, N.I. Svatiuk, O.M. Pop, et al. Scientific Bulletin of Uzhhorod University. Series "Chemistry", 43, 92 (2020).

ОСОБЛИВОСТІ РЕНГЕНОЛЮМІНЕСЦЕНТНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК, ОПРОМІНЕНИХ НА МІКРОТРОНІ М-30

О.І.Симканич[1], В.М.Красилинець[2], А.М.Соломон [2], Н.І.Сватюк[1], В.Т.Маслюк[1], Г.Ф.Пітченко[1]

[1]ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
[2]Інститут електронної фізики Національної академії наук України, Ужгород
e-mail: svatiuk@nas.gov.ua

Відомо, що результати дослідження ренгенолюмінесцентних характеристик органічних сполук до та після опромінення високоенергетичними ядерними частинками можуть дати цінну інформацію про їх структуру, чутливість до радіації та характер пост радіаційної еволюції їх параметрів. Об’єктами дослідження в даній роботі була органічна сполука-глюкоза, яка є типовим представником складних вуглеводнів, та джерелом енергії для живих організмів. Цінність вказаної речовини, полягає в її легкому проникненню в усі клітини, участь у процесах метаболізму людини, що пояснює її широке використанням у медицині та харчовій промисловості.

Вибраний об’єкт дослідження має хімічну структуру, елементи якої мають різну чутливість до дії радіаційних факторів. Так, глюкоза є полігідроксиальдегідом, що містить альдегідридну групу та 5 гідроксильних груп. Для їх будови характерною є наявність гідроксильних груп, 3D циклічна форма, різні типи хімічного зв’язку та різна чутливість структурних елементів до дії радіаційних факторів. У розчинах цукрів головну роль відіграють гідроксильні радикали, що утворюються при радіолізі води і відповідають за розрив зв'язку між вуглецем та воднем, інша можлива реакція - гідроліз на глікозидному зв'язку.

Дослідження спектрів рентгенолюмінесценції зразків органічних сполук проводилося у спектральному діапазоні 200–800 нм. Рентгенолюмінесцентні методи входять у велику групу фізичних методів аналізу, які конкурують з хімічними і навіть фізико-хімічними методами. Неруйнівні рентгенівські методи забезпечують дуже швидкий аналіз. Володіючи найвищою локальність серед методів аналізу хімічного складу речовини (до одного мікрона), вони придатні для проведення аналізу в точці, куди фокусується рентгенівський пучок. Це дозволяє отримувати картину розподілу елементів на відносно невеликій поверхні, тобто здійснювати «елементну топографію» поверхні зразка. При цьому виходить якісно нова інформація про форму знаходження елементів в складі досліджуваного речовини в цілому. Метод дозволяє виявляти дрібні сторонні хімічні включення. Область застосування даної групи методів постійно розширюється. Їх переваги - висока продуктивність, об'єктивність результатів, можливість багатоелементного аналізу, зручність автоматизації яка дає можливість визначення елементів від Mg до U, дослідження як рідких, так і твердих зразків у вигляді таблетованих порошків або компактних твердих тіл; - незалежність аналітичного сигналу від хімічної

форми елемента і агрегатного стану речовини; - широкий діапазон визначуваних концентрацій (19-4 - 102%), висока вибірковість (до 30 елементів одночасно), висока точність (0,3 - 1,0%), експресному (1-5 хвилин - час аналізу однієї проби); - сучасна висока техніка отримання та дослідження рентгенівських спектрів дозволяє визначати елементний склад домішок в аналізованої пробі до 0,01 - 0,001%.

Рентгенолюмінесцентнтне збудження здійснювалося за допомогою рентгенівської трубки БСВ-21 із кобальтовим антикатодом при прикладеній напрузі 40 кВ і струмі 15 мА. Виміри проводилися при кімнатній температурі за допомогою автоматизованої експериментальної установки на базі монохроматора МДР-23. В якості приймача випромінювання використовувався фотоелектронний помножувач (ФЕП) типу ФЭУ-106. Реєстрація експериментальних даних на виході ФЕП забезпечувалася використанням спеціально розробленої комп’ютерної програми, завдяки якій задавалася необхідна кількість відліку фотонів у кожній точці заданого спектрального інтервалу та крок сканування спектру із послідуючою обробкою результатів вимірювань. Такого роду експерименти проводились вперше, тому мають важливе наукове та практичне значення, як у прикладних науках так і в медицині в цілому.

Радіаційні дослідження проводився на мікротроні М-30 Інституту електронної фізики НАН України, параметри якого дозволяють плавно регулювати зміни енергії прискорених електронів в межах 1-25 МеВ з моноенергетичністю 0,02% та струмом пучка до 50 мкА. Для задач даного експерименту була вибрана енергія прискорених електронів 12,5 МеВ, щільність потоку на площі опромінювання складала 5,5 1010 ел./(см2 сек.), для кожного циклу опромінення досягався інтегральний потік 2 1014 ел./см2, що відповідає дозі опромінювання 1 МРад.

Представлено перші результати досліджень ренгенолюмінесцентних спектрів глюкози у вигляді порошку та водних розчинів. Вибір енергії прискорених електронів М-30 енергією вище 10 МеВ аналогічна радіаційним пошкодженням, які спричиняють нейтрони, чи важкі заряджені частинки. Досліджувалась рентгенолюмінесцентні спектри органічних сполук глюкози, при різних дозах опромінення 14 кГр та 164 кГр. Результати досліджень показали, що вплив радіаційного опромінення призводять до створення нелокальних точкових дефектів структури опромінюваних матеріалів, що в свою чергу відображається на рентгенолюмінесцентних спектрах. Показано, що радіація спричиняє особливості ренгеноструктурних характеристик спектрів, проявлення областей висвічування, обумовлених радіаційними пошкодженнями їх структури. Обговорюється часова еволюція отриманих радіаційних ефектів.

ДОСЛІДЖЕННЯ ВМІСТУ РАДІОНУКЛІДІВ У ВОДНО-ҐРУНТОВОМУ КОМПЛЕКСІ ТЕРИТОРІЇ БАСЕЙНУ Р. ТИСА

Н.І.Сватюк[1], О.М.Поп[1] , В.І.Роман[1], О.І.Симканич[2], І.В.Пилипченець[1], Е.В.Олейніков[1]

[1]Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород,
[2]ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: svatiuk@nas.gov.ua

Радіоекологічний моніторинг є важливою умовою забезпечення екологічної безпеки об’єктів довкілля. Реалізація радіоекологічного моніторингу гірських районів регіону дозволяє визначати фактори і джерела техногенного впливу на навколишнє середовище за вмістом і поширенням гамма-активних нуклідів (ГАН) природного та штучного походження, виділяти найбільш уразливі ланки екосистеми й оцінювати ступінь цього впливу. Це зумовлює пошук шляхів розробки нових методів комплексної оцінки радіоекологічного стану гірських регіонів і проведення досліджень, що дають змогу детально вивчити віддалені ядерні інциденти. Крім того, за ступенем впливу глобальних факторів (техногенні\природні) є можливість досліджень здатності живих організмів чинити опір вірусним інфекціям.

Українські Карпати є важливою частиною гірської системи континенту, а також потужним фактором, що регулює кліматичні умови країн Східної та Центральної Європи. Гори мають особливий ізотопний та мікроелементний склад ґрунтів і водних ресурсів. На геохімію гірських систем суттєво впливають фізико-хімічні умови середовища, які пов’язані з виходами скельних порід, та глобальні фактори, обумовлені кліматичними умовами. З іншого боку, гірські хребти є природними повітряними фільтрами, що акумулюють продукти діяльності людини, які переносяться вітрами з промислових районів Європи. Тому ізотопний та мікроелементний склад гірських ґрунтів та водних ресурсів формується і під впливом геохімічних факторів та діяльності людини. Подальше очищення гір відбувається під час сильних дощів та повеней, що реалізує циклічний обмін техногенних продуктів між високогірними та низинними гірськими районами Карпатського регіону. Гірські ріки мають більш інтенсивні потоки води, ніж низинні. Їх намули - дуже динамічна та інформативна субстанція, що є корисним для екологічного моніторингу значних прилеглих територій. Наявність ізольованих гірських районів з особливим мікроелементним складом ґрунтів та води обумовлює специфіку біоетносу, що проживає в ньому. Ці ж фактори є визначальними для оцінки екологічного стану басейнів гірських рік Карпат. Зазначимо, що і ефективність

адсорбції радіонуклідів гірськими хребтами, окрім сорту ґрунту, залежить від їх висоти та будови ландшафту. Можна вважати, що ГАН природного та штучного походження, що містяться у ґрунтах та донних відкладів гірських рік можуть служить «мітками» як геохімічних показників регіону, так і інтенсивності урбанізаційних процесів. Встановлення просторових закономірностей акумуляції та статистичної кластеризації ізотопів-міток для гірських територій важливе для встановлення стійкості їх радіологічних показників. На ці показники можуть впливати як вказані міграційні властивості, так і глобальні фактори, обумовлені атмосферними опадами і рухом повітря зі значних прилеглих територій. Продукти техногенної діяльності людини, які потрапляють в атмосферу, можуть змінювати структуру наземної радіоактивності. Такий вплив залежить від погодних умов, ґрунтового покриву, хімічних та фізичних властивостей радіонуклідів.

В даній роботі представлено результати радіоекологічного моніторингу поширення, концентрування та міграції радіонуклідів природного та штучного походження зразків водно-ґрунтового комплексу території р. Тиса. Представлені дані дослідження розподілу ГАН у ґрунтових профілях, донних відкладах малих річок та заповідних територіях Закарпатської області дозволяють виявити закономірності їх міграції та акумуляції у довкіллі [1]. Це, в свою чергу, дає можливість прогнозувати їх акумуляцію в майбутньому у об’єктах навколишнього середовища та розробляти заходи і засоби мінімізації негативного впливу ГАН на довкілля і людину.

Отримані при цьому дані є ідентифікаційними ознаками об’єкту дослідження та дають можливість паспортизації його ізотопного складу. Проведення радіаційного картографування досліджуваних прилеглих гірських територій дає змогу виявляти зони акумуляції ГАН, встановлювати тенденції міграції цих інгредієнтів у довкіллі, а також прогнозувати майбутній стан природно-заповідних об’єктів і прилеглих територій за цими показниками.

[1] V. Maslyuk, O. Symkanich, N. Svatyuk, O. Parlag, S. Sukharev. Nukleonika. 61, 351 (2016).

ЕФЕКТИВНІ ПЕРЕРІЗИ ФРАГМЕНТАЦІЇ ЯДРА ПЛУТОНІЮ-239 ПРИ ОПРОМІНЕННІ ПРОТОНАМИ 660 МеВ

А.М.Танчак[1,2], І.І.Гайсак[1], К.Катовскі[2], Р.Р.Голомб[1,2]

[1]Ужгородський національний університет, Ужгород
[2]Технологічний університет Брно, Брно, Чехія
e-mail: xtanch00@stud.feec.vutbr.cz

Проблема утилізації плутонію з відпрацьованого ядерного палива (ВЯП) є проблемою розповсюдження ядерної зброї та охорони навколишнього середовища. Ідея застосування глибоко підкритичних ADS (Accelerator Driven System) систем керованих прискорювачем, покликана поєднати трансмутацію ВЯП з генеруванням вторинного палива з природнього урану або торію, що дозволило б компенсувати витрати на знищення компонент ВЯП з великим часом напіврозпаду. Тому вивчення реакцій фрагментації плутонію протонами представляє значне практичне значення [1].

Експеримент проведено на Фазотроні Лабораторії ядерних проблем в Об'єднаному інституті ядерних досліджень (м. Дубна). Опромінення плутонієвої мішені відбувалося на виведеному пучку протонів енергією 660 МеВ. Мішень виготовлена у вигляді «сендвічу» фольг плутонію та алюмінію (Рис. 1).

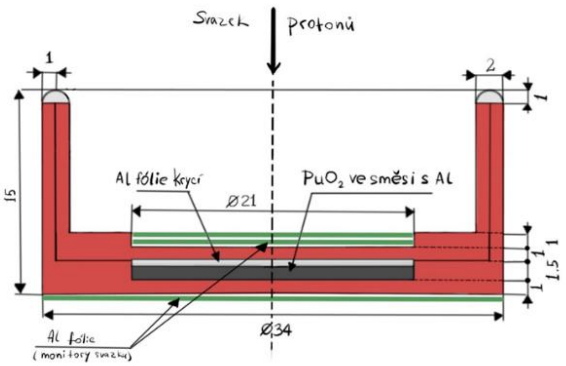


Рис. 1. Конструкція блоку мішеней.

Три фольги алюмінію слугували монітором падаючого протонного пучка, а одна колектором нуклідів фрагментації плутонієвої мішені. В якості дослідної мішені використано фольгу ^{239}Pu, розмір якої становив Ø21 х 1.5 мм і вагою 506 мг. Товщина кожної алюмінієвої фольги складала 58,1 мкм. При струмі виведеного пучка 2,02 мА, інтегральний потік протонів склав $(4{,}9 \pm 0{,}1)\cdot 10^{13}$. Моніторування протонного пучка проводилось на основі активованих алюмінієвих фольг по реакції ^{27}Al(p, 3p+n)^{24}Na. Вимірювання гамма спектрів виконувалося за допомогою чотирьох HPGe - детекторів компанії CANBERRA та ORTEC з ефективністю в межах 19% та 33% роздільною здатністю в межах 1,78 кеВ та 1.86 кеВ по лінії 1332 кеВ. Вимірювання опроміненої фольги тривало 11 годин, отримано 36 гамма

спектрів при різних часових періодах вимірювання. Для збору даних зі спектрометрів використовувалось програмне забезпечення MAESTRO v.4.10 фірми EG&G ORTEC.

Для обробки γ-спектрів використано програмне забезпечення DEIMOS32 [2] та набір скриптів на основі мови програмування Ruby [3]. В результаті обробки спектрів, отриманих від опроміненої мішені плутонію, виявлено 228 гамма-ліній, по яким, за енергією та періодом напіврозпаду, ідентифіковано 119 нуклідів.

Ідентифіковані нукліди мають масове число в діапазоні 7-237. Визначено перерізи фрагментації ядра ^{239}Pu під дією протонів 660 МеВ. Для порівняння експериментальних даних з теоретичними проводиться моделювання процесу фрагментації методом Моте-Карло в рамках пакету MCNP6 [4].

[1] A. Fokau, Accelerator-Driven Systems: Source Efficiency and Reactivity Determination. Stockholm: KTH Royal Institute of Technology,. Licentiate Thesis (2010).
[2] J. Frána, Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry 257, 583, (2003)
[3] R. Vespalec, YASNAPP-2 program package for data analysis 1.4. User’s Manual. (October 4, 2016), (unpublished).
[4] T. Goorley, et al., "Initial MCNP6 Release Overview", Nuclear Technology, 180, 298 (2012).

УНІТАРНІСТЬ І ВИРІШЕННЯ ПРОБЛЕМИ ФІНКЕЛЬШТЕЙНА-КАЙАНТІ У ДИФРАКЦІЙНОМУ НАРОДЖЕННІ АДРОНІВ

Г.С.Терсімонов, Є.С.Мартинов

Інститут теоретичної фізики імені М.М.Боголюбова НАН України, Київ
e-mail: tersimonov@bitp.kiev.ua

Теорія Редже дозволяє описувати процеси розсіяння в енергетичній області, де методи пертурбативної КХД виявляються незастосовними. У межах цієї теорії дифракційні процеси містять обміни помероном [1]. Але у даному підході у найпростішому наближенні померона з інтерсептом більшим за одиницю повний переріз взаємодії адронів порушує границю Фруасара-Мартена. Це має місце й у народженні багатьох адронних злив, розділених на шкалі рапідіті великими проміжками: перерізи зростають швидше за границю Фруасара-Мартена. Дане протиріччя відоме як проблема Фінкельштейна-Кайанті [2].

У роботі пропонується підхід до відновлення унітарності, заснований на перенормуванні померона і трипомеронної вершини у термінах рівнянь Дайсона-Швінгера. Померон обирається у його максимальній формі, що забезпечує зростанні перерізу у відповідності з границею Фруасара-Мартена та експериментальними даними. Такий померон зазвичай називають фруасароном. Припускається, що трифруасаронна вершина містить нулі у площині комплексного кутового моменту при деяких значеннях переданого імпульсу. Показано, що параметри даної моделі можуть бути вибрані так, що порушення умови унітарності у народженні адронних злив не відбувається.

Таким чином, у розглянутій моделі протиріччя Фінкельштейна-Кайанті нема.

[1] P.D.B. Collins, An Introduction to Regge Theory and High Energy Physics (Cambridge University Press, 1977).
[2] J. Finkelstein, K. Kajantie, Phys. Lett. B 26, 305 (1968); Nuovo Cimento A56, 659 (1968).

ВПЛИВ РАДІАЦІЙНО-МОДИФІКОВАНИХ НА МІКРОТРОНІ М-30 (12,5 МЕВ) СПИРТОВИХ РОЗЧИНІВ НА ПРОБІОТИЧНІ МІКРООРГАНІЗМИ

С.А.Тимощук[1], В.Т.Маслюк[2], Н.В.Бойко[1]

[1]ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
[2]Інститут електронної фізики Національної академії наук України, Ужгород
e-mail: svitlana.tymoshchuk@uzhnu.edu.ua

Відомою є висока антибактеріальна дія етилового спирту із концентрацією 75%, що дозволяє його використання як дезінфектанта. Проте, можливість його застосування при обробці харчових продуктів є обмежена, оскільки до його дії чутливі не лише умовно-патогенні, а й коменсальні мікроорганізми. Це зумовлює актуальність пошуку нових технологій та способів модифікації спиртових розчинів для розширення його біологічної активності, наприклад, на сферу пробіотичних мікроорганізмів. Одним з найбільш перспективних серед них є використання радіаційних технологій [1].

Метою даного дослідження було вивчення впливу радіаційно-оброблених на мікротроні М-30 водно-спиртових розчинів на ріст культур пробіотичних мікроорганізмів. Дослідження проводились у два етапи: 1) вплив вибраних розчинів на бактерії відразу ж після опромінення; 2) такі ж дослідження після 24 годин закінчення процесу опромінення, тобто, вивчення їх часової еволюції.

В експерименті використовуються 5%-вий водний розчин етилового спирту, опромінений гальмівним γ–випромінюванням на мікротроні М-30 із максимальною енергією 12,5 МеВ, дозою в 1 MRad.

Біологічні ефекти усіх тестованих розчинів оцінювали за наявністю/відсутністю в них антибактеріальної чи стимулюючої дії стосовно вибраних нами тест-мікроорганізмів. Об’єктами дослідження були грампозитивні спорові *Bacillus subtilis* (штами 8130 та 090) та неспорові бактерії *Bifidobacterium bifidum* і *Lactobacillus plantarum A.* Спільною ознакою взятих для дослідження мікроорганізмів є те, що вони становлять основу пробіотиків і належать до нормальної мікробіоти [2].

З добової культури відповідних мікроорганізмів готували зависі бактеріальної суспензії за стандартом каламутності 0,5 одиниць щільності за МакФарландом ($1{,}5\times10^8$ КУО), який встановлювали за допомогою денситометра Den-1. Чистоту культури визначали бактеріоскопічно за методом Грама з використанням імерсійної мікроскопії і світлового мікроскопа: Primo Star iLED, Carl Zeiss. Кількість мікроорганізмів, які встановлюються за показником колонієутворюючих одиниць в 1 мл (КУО/мл) знаходили за

допомогою планшетного методу для виготовлення десятикратних серійних розведень з наступним їх висівом на відповідні зазначені вище селективні поживні середовища [3].

Експерименти проводилися методом in vitro, досліджувалася часова еволюція неопромінених мікроорганізмів у γ–опромінених спиртових розчинах. Наші дослідження показали (табл.1), що 5%-вий водний розчин етилового спирту, оброблений в радіаційному полі гальмівного γ–випромінювання, на обидвох етапах стимулює ріст неспорових пробіотичних бактерій *L. plantarum A* (відразу після $2 \cdot 10^8$ КУО/мл та після доби після-радіаційного «охолодження» $1 \cdot 10^{12}$ КУО/мл) та *B. bifidum* (концентрація на 1 етапі $1 \cdot 10^{12}$ КУО/мл та на 2 етапі $1 \cdot 10^{10}$ КУО/мл). Можна припустити, що порівняно низька концентрація етилового спирту (5%) у воді знизила кислотність середовища, тим самим сприяючи росту молочнокислих бактерій.

Цікаво, що для спорових пробіотичних бактерій *B. subtilis* 8130 (концентрація на 1 етапі - $1x10^8$ та на 2 етапі - $1,5x10^5$) та *B. subtilis 090* (концентрація - $1x10^4$ КУО/мл та на 2 етапі - $1x10^6$ КУО/мл) цей ефект не повторився, - 5%-вий водний розчин етилового спирту не стимулював, а навпаки – інгібував ріст бацил.

Таблиця 1. Кількісний вплив 5%-го водного розчину етилового спирту (γ-випромінювання)

№	Назва розчину	Концентрація, в одиницях КУО/мл							
		L. plantarum A		*B. bifidum*		*B. subtilis* 8130		*B. subtilis* 090	
		Етап 1	Етап 2	Етап 1	Етап 2	Етап 1	Етап 2	Етап 1	Етап 2
1	Неопромінений 5%-вий водний розчин етилового спирту	$8 \cdot 10^{11}$	$2 \cdot 10^{12}$	$8 \cdot 10^{10}$	$3 \cdot 10^{10}$	$1 \cdot 10^{10}$	$2 \cdot 10^{6}$	$1 \cdot 10^{10}$	$1 \cdot 10^{10}$
2	Опромінений 5%-вий водний розчин етилового спирту.	$2 \cdot 10^{8}$	$1 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{10}$	$1 \cdot 10^{8}$	$1,5 \cdot 10^{5}$	$1 \cdot 10^{4}$	$1 \cdot 10^{6}$

Встановлені біологічні ефекти становлять значний дослідницький інтерес, оскільки дозволяють селективно регулювати умови метаболізму різного типу мікроорганізмів і варті подальшого їх вивчення.

[1]. N. Dikiy, A.Dovbnya, E.Skakun, V. Uvarov, https://vant.kipt. kharkov.ua/ARTICLE/ VANT_2001_1/article_2001_1_26.pdf
[2]. Т.І. Кордон, Принципи створення, механізм дії та клінічне застосування пробіотиків Аннали Мечниковського інституту 4, 8 (2014).
[3]. O. Symkanych, V. Maslyuk, N. Boyko, S. Tymoshchuk et al, Scientific Bulletin of Uzhhorod University. Series Chemistry 43, 92 (2020).

ТЕЧІЯ КУЕТТА МІЖ ДВОМА КОАКСИАЛЬНИМИ ОБЛОНКАМИ

О.О.Усатова

Інститут проблем машинобудування ім. А.М. Підгорного НАН України, Київ
e-mail: usatova.olia@gmail.com

Системи рівнянь, які описують рух дисипативних нестисливих рідин, базується на дослідженні розв'язку векторного рівняння Нав'є – Стокса, доповненого рівнянням нестислості [1,2]. Але, як вхідне рівняння, дослідники рідини зазвичай використовують рівняння Ейлера, що описує рух ідеальної рідини, додаючи при цьому різні доданки, які враховують дисипативний ефект суцільного середовища [2]. Проявом розвитку дисипативного ефекту є спурт-ефект – нестійкості течії в капілярах та вузьких щілинах, складається ефект в різкому збільшенні витрати рідини при невеликих змінах градієнту тиску в певній області параметрів течії [3].

При вивченні течії Куетта між паралельними стінками з врахуванням в'язко-пружних характеристик середовища, однією зі складних проблем є визначення структури стаціонарного розв'язку при достатньо великій різниці швидкостей стінок. Ця проблема пов'язана зі стійкістю розглянутої течії та спурт-ефекту [4].

Нехай одна зі стінок нерухома, а інша рухається зі швидкістю U. Рідина між двома стінками при цьому, знаходиться в русі. Визначимо розподіл швидкостей рідини. Рух такої рідини описується рівнянням:

$$\frac{1}{\mu}\frac{dp}{dx}=\frac{d^2V}{dy^2} \tag{1}$$

з граничною умовою:

$$V|_{y=0}, V|_{y=h}=U \tag{2}$$

Взявши інтеграл від (1) і (2) отримаємо рівняння швидкості:

$$V=\frac{y}{h}U-\frac{h^2}{2\mu}\frac{dp}{dx}\frac{y}{h}\left(1-\frac{y}{h}\right) \tag{3}$$

Для нульового перепаду тиска, отримуємо лінійний розподіл швидкостей:

$$V=\frac{y}{h}U \tag{4}$$

Течія з таким розподілом швидкостей називають простою течією Куетта або течією чистого зсуву. При перепаді тиску відбувається накладення простої течії Куетта та течії в каналі. Форму кривої розподілу швидкостей при течії Куетта можна визначити безрозмірним градієнтом тиску:

$$P=\frac{h^2}{2\mu U}\left(-\frac{dp}{dx}\right) \tag{5}$$

Для будь-якої задачі про рух в'язкої рідини в заданих стаціонарних умовах, має існувати точне стаціонарне рішення рівняння гідродинаміки. Ці розв'язки (3-5), формально, існують при будь-яких числах Рейнольдса. При стаціонарному обтіканні твердого тіла в'язкою рідиною, рух рідини на великих відстанях за тілом, може бути дослідженим незалежно від форми тіла.

Течія Куетта - ламінарна течія в'язкої рідини, що виникає між двома паралельними стінками, які рухаються одна відносно іншою з однаковою швидкістю, але в різних напрямках. Однак експерименти показують, що така течія переходить з ламінарного в турбулентний режим при числах Рейнольдса в межах від 300 до 500 [5,6]. Одним з можливих шляхів подолання суперечності між теорією і експериментом є розгляд течії Куетта між двома циліндрами при наближенні радіусів до нескінченності або при наближенні кривини до нуля. При цьому, можна довести, що така задача переходить в плоску задачу Куетта, та отримати умови нестійкості течії [7].

У задачі про течію між коаксіальними циліндрами існує відмінність режимів течії: з нерухомим внутрішнім циліндром та нерухомим зовнішнім. Це зумовлено різним характером відцентрових сил, які діють на частинки речовини при їх русі за круговими траєкторіями.

Тейлор довів, що існує критична швидкість обертання циліндра, вище якої одномірна слоїста течія перебудовується, і в поперечному перерізі з'являється система парних тороїдальних вихрів, які обертаються в протилежних напрямках. При цьому, в подальшому рості швидкості обертання після появи вихрів виникають нові біфуркації, що призводять до появи нових структур. Це явище було враховано при дослідженні течії Куетта між двома коаксіальними оболонками, коли один або два циліндра обертаються.

[1] Г.З. Гершуни, Е.М. Жуховицкий Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. (Москва:Наука, 1972. 392 с.)
[2] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц Теоретическая физика: В 10 тт.: Т. 6: Гидродинамика. 5-е изд. (Москва: Физматлит, 2006. 736 с.)
[3] G.V. Vinogradov, A.Ya. Malkin, Yu.G. Yanovskii, E.K. Borisenkova, B.V. Yarlykov, G.V. Berezhnaya, J. Polym. Sci.Part A-2. 10, 1061 (1972).
[4] В.Ю. Ляпидевский, Труды Математического института им. В.А. Стеклова, , 300, 146 (2018).
[5] А.В. Бойко, Г.Р Грек., А.В. Довгаль, В.В. Козлов (Новосибирск: Наука, 1999).
[6] N. Tillmark, P. Alfredsson J. Fluid Mech. 235, 89 (1992).
[7] Sone Y., Doi T. Proc. 24th Intern. Symp. RGD. New York, Mellville, 258 (2005).

ПРУЖНЕ РОЗСІЮВАННЯ ЕЛЕКТРОНА НА МОЛЕКУЛІ АМІНОКИСЛОТИ ТРЕОНІНУ

Ш.Ш.Демеш[1], О.В.Васильєв[2], Є.Ю.Ремета[2]

[1]*Institute for Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen, Hungary*
[2]*Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород*
e-mail: vasyliev.oleksandr.1996@gmail.com

Наведено порівняння диференціальних перерізів (ДП) потенціального розсіювання електрона на амінокислоті D-треоніні ($C_4H_9NO_3$) розрахованих у 2-х наближеннях, IAM та Ad, моделі незалежних атомів (див. опис та посилання у [1]). Амплітуди та перерізи пружного розсіювання електрона атомами H, C, N, O, які складають цю біомолекулу, знайдено у методі оптичного потенціалу, наближення SEPA (з врахуванням ефектів поглинання) за програмою ELSEPA [2] (також див. [1]).

У IAM наближенні, яке повністю відповідає моделі незалежних атомів, враховано т.зв. інтерференційні доданки, що виникають завдяки просторовому розташуванню атомів молекули треоніну (з міжатомними відстанями r_{ij}, i,j=1-17). У Ad-наближенні ДП розсіювання електрона на молекулі треоніну дорівнює простій сумі ДП розсіювання на її 17 атомах. Міжатомні відстані r_{ij} молекули D-треоніну взято з [3].

На рис.1 представлено порівняння ДП розсіювання електрона на молекулі D-треоніну у вказаних 2-х наближеннях для енергій зіткнень 20, 40, 60 та 100 еВ. Бачимо, що при енергіях зіткнення 20, 40 та 60 еВ IAM-ДП найбільше відрізняються (в основному перебільшують) від Ad-перерізів у області малих кутів розсіювання. Так, при 20 еВ така відмінність є до 70°, для 40 еВ до 40°, для 60 еВ до ~25°. Але, зі збільшенням енергії IAM-ДП поступово відрізняються від Ad-ДП у всьому інтервалі кутів розсіювання. Найбільшу відмінність між ДП вказаних наближень бачимо для енергії зіткнення 100 еВ. Перевищення IAM-ДП над Ad-ДП видно тільки у вузькому інтервалі кутів розсіювання вперед – ~17°. При більших кутах, у діапазоні кутів до 180° IAM-ДП менші за величиною від Ad-ДП. Більш того, IAM-ДП мають певну кутову структуру. Все це важлива роль інтерференції амплітуд розсіювання електрона від різних атомів молекули D-треоніну, що знаходяться на певних міжатомних відстанях.

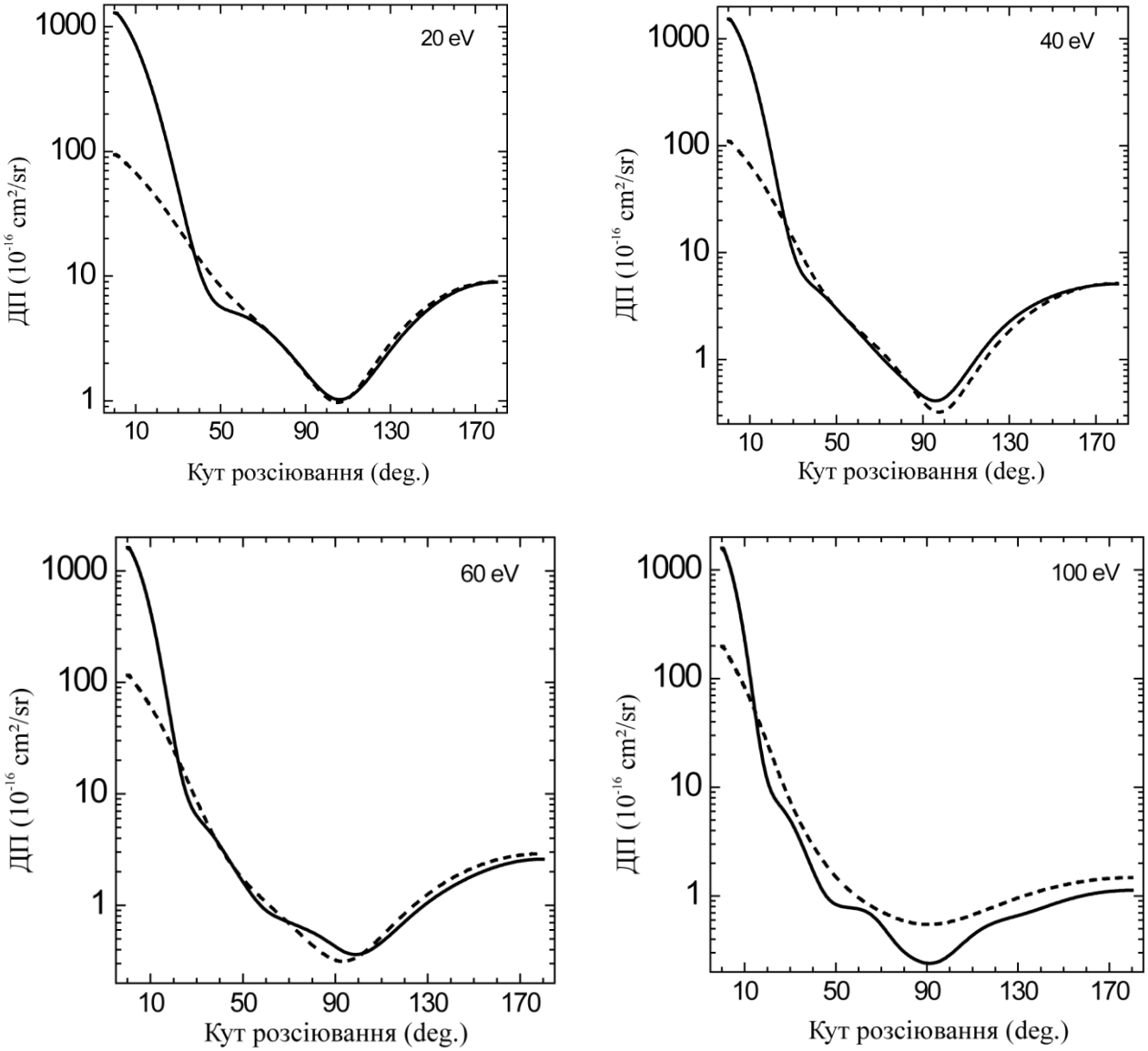


Рис. 1. Диференціальні перерізи пружного розсіювання електрона на молекулі D-треоніну при енергіях 20, 40, 60, 100 еВ. Наближення IAM (——) та Ad (-----) моделі незалежних атомів.

Дослідження виконано за часткової фінансової підтримки з боку УНФД (грант № 2020.01/0009 «Вплив іонізуючого випромінювання на структуру молекул амінокислот»)

[1] Ш.Ш. Демеш, О.В. Васильєв, Е.Ю. Ремета, Науковий вісник УжНУ. Сер. Фізика 48, 102 (2020).
[2] F. Salvat, A. Jablonski, C.J. Powell, Comp. Phys. Commun. 165, 157 (2005).
[3] Електронний ресурс [https://doi.org/10.1093/nar/gkq985].

ОДНОКРАТНА ІОНІЗАЦІЯ МОЛЕКУЛИ АМІНОКИСЛОТИ ВАЛІНУ

О.В.Васильєв[1], Ш.Ш.Демеш[2], А.І.Булгакова[1], Є.Ю.Ремета[1]

[1]Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
[2]Institute for Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen, Hungary
e-mail: vasyliev.oleksandr.1996@gmail.com

Розраховані перерізи для процесу однократної іонізації молекули амінокислоти валіну електронним ударом. Розрахунки перерізів проведено за аналітичними виразами, що використовують у відомих наближеннях – Binary-Encounter-Bethe (BEB), Гризінського (Gryz) [1-4].

Енергетичні характеристики молекулярних орбіталей (МО), енергії зв'язку та середні кінетичні енергії електронів, D-, DL-, L-форм молекули валіну $C_5H_{11}NO_2$ (Val, m/z=117) та її іона Val^+ були розраховані у теорії функціоналу густини (ТФГ) за програмою GAUSSIAN [5]. У адіабатичному (за повними енергіями $E_t[M^+]$, $E_t[M]$) та молекулярних орбіталей (за енергією зв'язку $E_b^{HOMO}(M)$) наближеннях цього підходу було розраховані потенціали іонізації $I(M)=E_t[M^+]-E_t[M]$ і $I(M)=-E_b^{HOMO}(M)$ (див. Табл.1).

Таблиця 1

Енергетичні характеристики D-, DL- та L-форм молекули валіну

D-, DL- і L- валін (Val $C_5H_{11}NO_2$)			
Енергія	D-Val	DL-Val	L-Val
Адіабатичне наближення			
E_t[Val], a.u.	-402.528375	-402.528370	-402.528231
$E_t[Val^+]$, a.u.	-402.184155	-402.184129	-402.184310
I(Val), eV	9.367	9.367	9.359
Наближення молекулярних орбіталей			
E_b^{HOMO}(Val), a.u.	-0.253093	-0.25311	-0.253300
I(Val), eV	6.887	6.888	6.893
Експеримент, eV			
8.66 ± 0.22			

За BEB та Gryz наближеннями, за 32 МО вказаних форм молекул, розраховано сумарні перерізи однократної іонізації (від порогів до 200 eV) електронним ударом (див. рис.1). Бачимо схожу поведінку та величини перерізів іонізації для наведених форм молекули валіну. Це тому, що енергії зв'язку та середні кінетичні енергії електронів на МО цих форм близькі.

При малих енергіях, повний експериментальний переріз іонізації визначається саме перерізом однократної іонізації материнських молекул. Нормування відносних величин експериментальних перерізів на теоретичні дані, проведене, наприклад, при енергіях близьких до порогів іонізації, дає можливість отримати абсолютні значення перерізів.

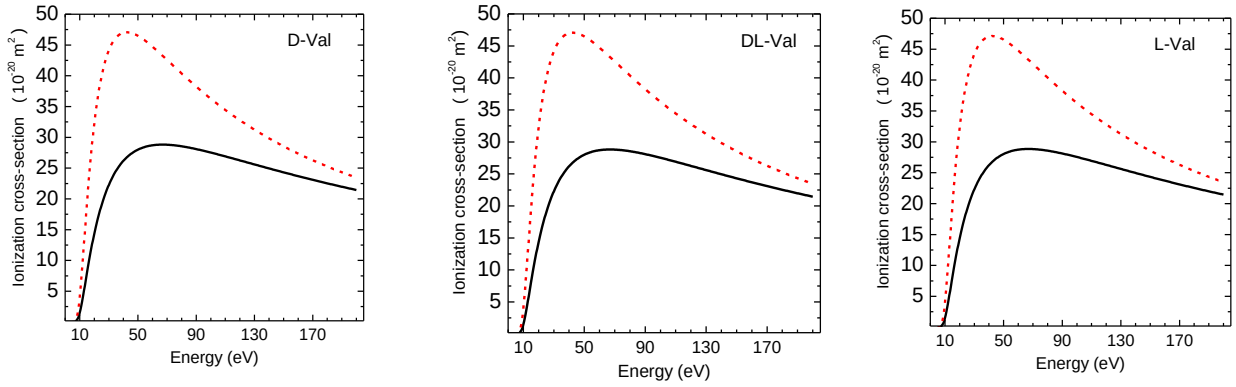


Рис. 1. Енергетичні залежності розрахованих сумарних перерізів однократної іонізації D-, DL-, L-форм молекули валіну: BEB-ТФГ (——); Gryz-ТФГ (- - -).

За відповідними формулами аналітичної апроксимації можна провести апроксимацію цих абсолютних значень. Отримані параметри апроксимації можна використовувати у виразах для обчислення повних перерізів іонізації при проміжних і високих енергіях, для обчислення швидкостей іонізації цих молекул електронами.

Дослідження виконано за часткової фінансової підтримки з боку УНФД (грант № 2020.01/0009 «Вплив іонізуючого випромінювання на структуру молекул амінокислот»)

[1] K. Yong-Ki, M.E. Rudd Phys. Rev. A. 50, 3954 (1994).
[2] K. Yong-Ki, K.K. Irikura, M.A. Ali, J. Res. Nat. Inst. Stand. Technol. 105, 285 (2000).
[3] H. Tanaka, M.J. Brunger, L. Campbell, H. Kato, M. Hoshino, A.R.P. Rau, Rev. Mod. Phys 88, 025004 (2016).
[4] M. Gryziwski Phys. Rev. 138, 336 (1965).

ОДНОКРАТНА ІОНІЗАЦІЯ АМІНОКИСЛОТ ТРЕОНІНУ ТА ТИРОЗИНУ

О.В.Васильєв[1], Ш.Ш.Демеш[2], Є.Ю.Ремета[1]

[1]Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
[2]Institute for Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen, Hungary
e-mail: vasyliev.oleksandr.1996@gmail.com

Наведено розрахунки перерізів процесу однократної іонізації молекул амінокислот треоніну та тирозину електронним ударом. Розрахунки перерізів проведено за аналітичними виразами, що використовують у відомих наближеннях – Binary-Encounter-Bethe (BEB) та Гризінського (Gryz) [1-4].

Енергетичні характеристики молекулярних орбіталей (МО) молекул треоніну $C_4H_9NO_3$ (Thr, m/z=119) та тирозину $C_9H_{11}NO_3$ (Tyr, m/z=181) – енергії зв'язку та середні кінетичні енергії електронів – були розраховані у наближенні Хартрі-Фока (ХФ). За енергією зв'язку $E_b^{HOMO}(M)$ МО – $I(M)=-E_b^{HOMO}(M)$ – проведено оцінку потенціалів іонізації молекул. Вони становлять (у eV) для розрахованих форм молекул:

Allo-Thr – 10.9862, **D-Allo-Thr** – 11.1125, **D-Thr** – 10.9458, **L-Thr** – 11.2186;

D-Tyr – 88037, **L-Tyr** – 9.0596, **Meta-Tyr** – 9.2127.

Для МО D- та L-форм молекул, 32 для треоніну та 48 для тирозину, за вказаними BEB та Gryz наближеннями розраховано перерізи однократної іонізації (від порогів до 200 eV) електронним ударом та отримано сумарні перерізи (див. рис.1). При малих енергіях, близьких до порогових, повний експериментальний переріз іонізації визначається саме перерізом однократної іонізації материнських молекул. Нормування відносних величин експериментальних перерізів на теоретичні дані, проведене при енергіях близьких до порогів іонізації, дає можливість отримати для них абсолютні значення. За відповідними формулами аналітичної апроксимації можна провести апроксимацію (fitting) цих абсолютних значень. Отримані параметри апроксимації можна впевнено використовувати у відповідних виразах для

обчислення повних перерізів іонізації при проміжних і високих енергіях, для обчислення швидкостей іонізації цих молекул електронами.

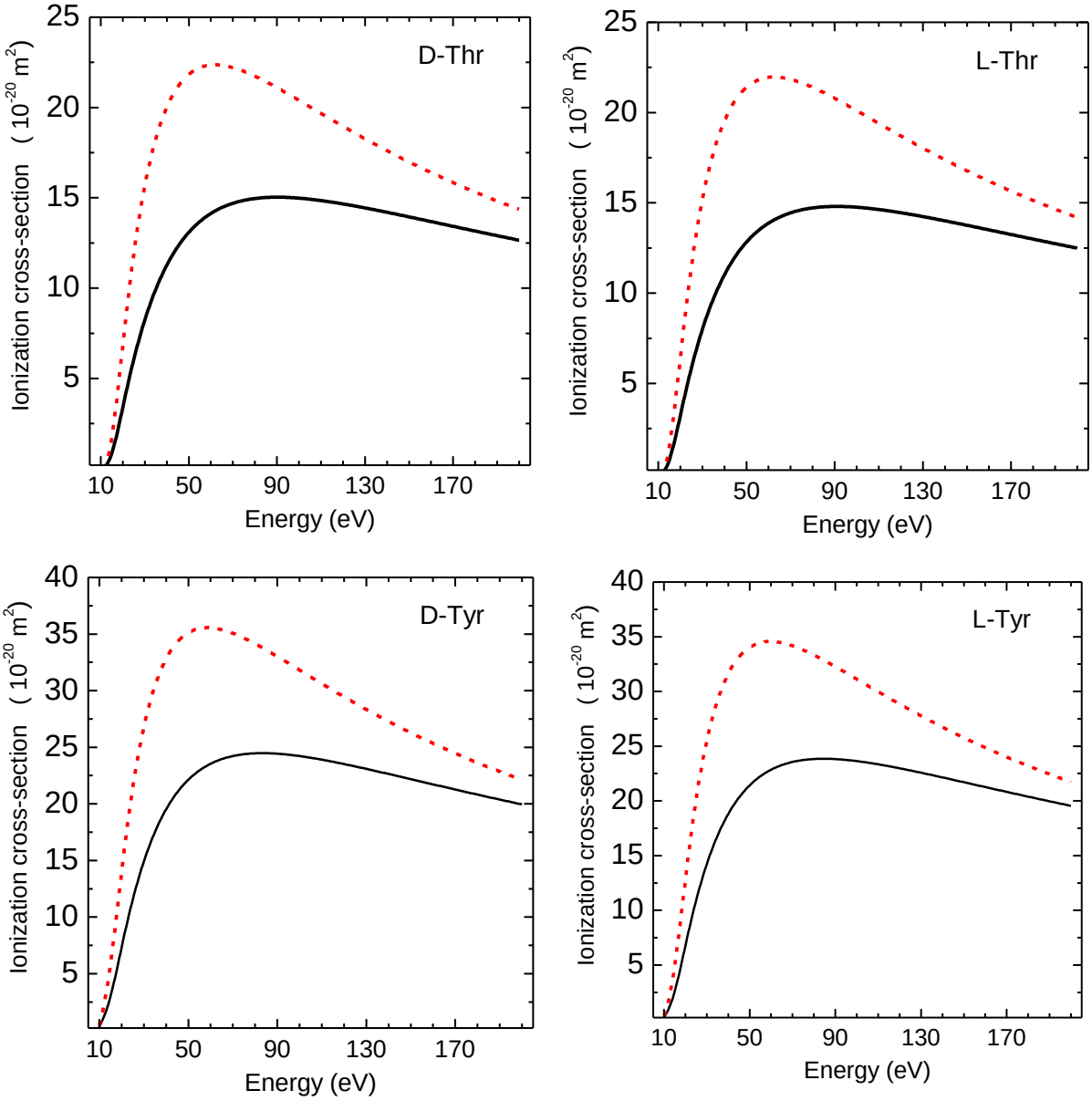


Рис. 1. Енергетичні залежності розрахованих сумарних перерізів однократної іонізації D- та L-форм молекул треоніну (Thr) та тирозину (Tyr): BEB-ХФ (——); Gryz-ХФ (- - -).

Дослідження виконано за часткової фінансової підтримки з боку УНФД (грант № 2020.01/0009 «Вплив іонізуючого випромінювання на структуру молекул амінокислот»)

[1] K. Yong-Ki, M.E. Rudd, Phys. Rev. A. 50, 3954 (1994).
[2] K. Yong-Ki, K.K. Irikura, M.A. Ali J. Res. Nat. Inst. Stand. Technol. 105, 285 (2000).
[3] H. Tanaka, M.J. Brunger, L. Campbell, H. Kato, M. Hoshino, A.R.P. Rau, Rev. Mod. Phys. 88, 025004 (2016).
[4] M. Gryziwski, Phys. Rev. 138, 336 (1965).

ОДНОКРАТНА ІОНІЗАЦІЯ СКЛАДНИХ БІОМОЛЕКУЛ

О.В.Васильєв[1], Ш.Ш.Демеш[2], Е.Ю.Ремета[1]

[1]Institute for Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen, Hungary
[2]Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна
e-mail: vasyliev.oleksandr.1996@gmail.com

Викладено методику дослідження перерізів процесу однократної іонізації біомолекул електронним ударом. Наведено аналітичні вирази для сумарних, за молекулярними орбіталями, перерізів цього процесу, що використовують у відомих наближеннях: BED (Binary-Encounter-Dipole), BEB (Binary-Encounter-Bethe), формула Гризінського (Gryz) [1-4]. Описано аналітичну апроксимацію цих перерізів за відповідними формулами. Розраховано потенціал іонізації та перерізи іонізації D-форми молекули амінокислоти глутаміну ($C_5H_{10}N_2O_3$, m/z=146) електронним ударом.

Характеристики структури молекули глутаміну були розраховані у наближеннях теорії функціоналу густини (ТФГ) і Хартрі-Фока (ХФ). У BEB наближенні використовують такі енергетичні характеристики молекулярних орбіталей молекули D-глутаміну: енергії зв’язку та середні кінетичні енергії електронів. Для формули Гризінського як енергетичні характеристики молекулярних орбіталей використовують тільки енергії зв’язку електронів. Всього враховано ці характеристики для 32 орбіталей.

На рис. 1 наведено обчислені за BEB наближенням і за формулою Гризінського сумарні перерізи однократної іонізації (від порогів до 60 eV) молекулярних орбіталей D-форми молекули глутаміну електронним ударом. Бачимо, що Gryz-ТФП переріз швидко зростає та досягає максимуму при ~40 eV, а Gryz-ХФ переріз зростає значно повільніше (максимум при ~60 eV) та його поведінка подібна до BEB-ТФГ і BEB-ХФ перерізів.

При малих енергіях, близьких до порогових, повний експериментальний переріз іонізації визначається перерізом однократної іонізації саме материнських молекул. Нормування відносних величин експериментальних повних перерізів іонізації на теоретичні дані, проведене, наприклад, при енергії 8.5 eV у випадку D-форми молекули глутаміну, дасть можливість отримати абсолютні значення цих перерізів.

Наведені формули дають можливість провести апроксимацію (fitting) абсолютних виміряних значень повних перерізів (див. [1]). Для апроксимації використовують формули у BED- та BEB-моделях і у наближенні Гризінського. Апроксимацію проводять використовуючи метод найменших квадратів із залученням експериментально виміряних значень порогів іонізації. Для

трипараметричної апроксимації у BED- і BEB-моделях параметри можуть бути досить великими. Параметри отримані при використанні наближення Гризінського можуть бути менші за величиною і мати більш малі помилки, внаслідок використання саме 4-х параметрів. Отримані таким чином параметри апроксимації можна впевнено використовувати у відповідних формулах для обчислення повних перерізів іонізації при проміжних і високих енергіях, а також для обчислення швидкостей іонізації даних молекул електронами.

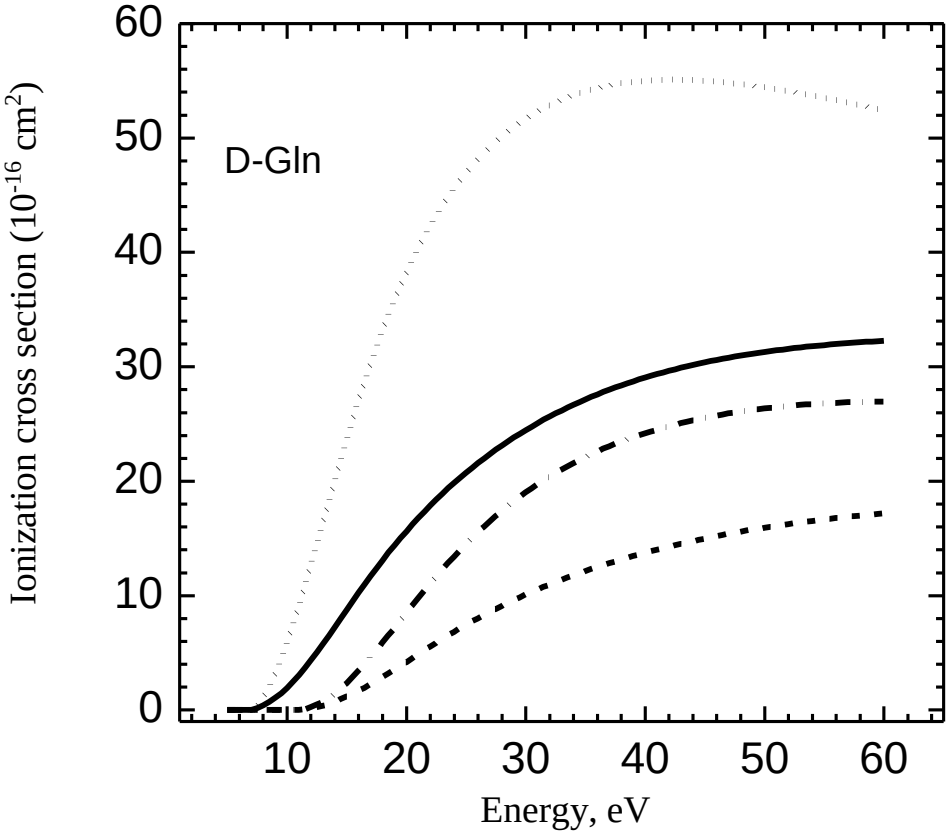


Рис. 1. Розрахунки сумарних перерізів однократної іонізації D-форми молекули глутаміну: BEB-ТФГ(——); BEB-ХФ (- - -); Gryz-ТФГ (···); Gryz-ХФ (– · – · –).

Дослідження виконано за часткової фінансової підтримки УНФД (грант № 2020.01/0009 «Вплив іонізуючого випромінювання на структуру молекул амінокислот»).

[1] K. Yong-Ki, M.E. Rudd, Phys. Rev. A. 50 (5), 3954 (1994).
[2] K. Yong-Ki, K.K. Irikura, M.A. Ali, J. Res. Nat. Inst. Stand. Technol. 105 (2), 285 (2000).
[3] H. Tanaka, M.J. Brunger, L. Campbell, H. Kato, M. Hoshino, A.R.P. Rau, Rev. Mod. Phys. 88, 025004, 1 (2016).
[4] M. Gryzinski, Phys. Rev. 138 (2A), A336 (1965).

СПЕКТРОСКОПІЯ МІЖЗОРЯНОГО СЕРЕДОВИЩА ЗА ДОПОМОГОЮ НИЗЬКОЧАСТОТНИХ РЕКОМБІНАЦІЙНИХ РАДІОЛІНІЙ ВУГЛЕЦЮ. ВЕЛИКОМАСШТАБНИЙ ОГЛЯД ГАЛАКТИКИ НА РАДІОТЕЛЕСКОПІ УТР-2

Є.В.Васильківський, О.О.Коноваленко, С.В.Степкін

Радіоастрономічний інститут НАН України, Харків
e-mail: vasylkivskyi@rian.kharkov.ua

Вивчення властивостей високозбуджених рідберговських атомів у космічному середовищі становить інтерес як для астрофізики, так і для атомної фізики. Космічне середовище може являти собою «лабораторію», в котрій вивчатиметься речовина при вкрай низьких або вкрай високих температурах, густинах, тисках, які неможливо відтворити в наземних лабораторіях. Найбільш ефективним інструментом вивчення високозбуджених атомів у космосі є рекомбінаційні радіолінії. Вони утворюються внаслідок каскадних переходів рекомбінованого на високий квантовий рівень електрона на нижчележачі рівні, що призводить до випромінювання фотона для кожного такого переходу. Енергія фотона відповідає частоті рекомбінаційної радіолінії, яка буде спостерігатися. Ці лінії досліджуються в широкому діапазоні радіохвиль – від міліметрових (надвисокі частоти, > 30 ГГц) до декаметрових (наднизькі частоти, < 30 МГц). Декаметрові рекомбінаційні радіолінії вуглецю вперше були зареєстровані більше сорока років тому на українському радіотелескопі УТР-2 [1], і за цей час зарекомендували себе унікальним та найбільш точним засобом діагностики фізичних умов у холодному, розрідженому міжзоряному газі. За допомогою цих ліній на УТР-2 та інших радіотелескопах були вивчені десятки напрямів у Галактиці. Основні спостережувані характеристики рекомбінаційних радіоліній – відносна інтенсивність та ширина лінії, а також їх залежності від частоти, можуть бути використані для визначення основних параметрів міжзоряного середовища – електронної температури, електронної густини, міри емісії [2].

Спостереження низькочастотних рекомбінаційних радіоліній вуглецю на УТР-2 в попередні роки проводились у відносно вузькій смузі аналізу (близько 1 МГц) за допомогою багатоканальних цифрових корелометрів. Ці пристрої дають високу частотну роздільну здатність, але їхня вузька смуга аналізу та малий динамічний діапазон обмежують ефективність використання радіотелескопа для високочутливих спектроскопічних досліджень.

Вищенаведена складність вирішується шляхом використання при спостереженнях низькочастотних рекомбінаційних радіоліній вуглецю на радіотелескопі УТР-2 спектроаналізаторів DSP-Z [3]. Ці багаторозрядні та

завадостійкі прилади мають широку, безперервну смугу аналізу, що повністю перекриває робочий діапазон частот УТР-2 – від 8 до 32 МГц, та великий динамічний діапазон. Широкосмуговість приладу дозволяє повною мірою реалізувати важливу особливість рекомбінаційних радіоліній, властиву їм тільки на низьких частотах. Справа в тому, що зі зменшенням частоти спостережень зменшуються також і відстані між сусідніми лініями в спектрі за частотою. Високі квантові рівні в атомах мають вкрай низьку різницю енергій, тому можна розглядати відповідні їм лінії як еквівалентні та усереднювати їх, що відповідатиме збільшенню ефективного часу накопичення та, відповідно, чутливості вимірювань.

У доповіді будуть представлені перші результати програми з вивчення великомасштабного розподілу іонізованого вуглецю в Галактиці за даними спостережень низькочастотних рекомбінаційних радіоліній. Для аналізу були використані дані, отримані на УТР-2 в режимі неперервного добового сканування небесної сфери. У такому режимі антена радіотелескопа, встановлена в зенітному положенні, двічі на добу перетинає Галактичну площину, а також охоплює високоширотні напрями Галактики, які дотепер у низькочастотних лініях вуглецю не досліджувались. Окрім ліній від Галактичної площини та прилеглих до неї ділянок, вперше були зареєстровані лінії від високоширотних областей Галактики. Реєстрація ліній від таких областей, де немає жодних потужних іонізуючих континуальних джерел, говорить про те, що вони сформувались у розповсюдженому компоненті міжзоряного середовища, пов’язаному, як вважається, з низькощільним атомарним газом. Цей газ у Галактиці, в основному, представлений хмарами нейтрального водню HI, які можуть містити вуглець, котрий, на відміну від водню, має менший потенціал іонізації та легше іонізується ультрафіолетовим випромінюванням від найближчих потужних зір. Отримані нами спектри ліній вуглецю мають високий ступінь кореляції зі спектрами лінії нейтрального водню HI, отриманими в ході проведення огляду LAB Survey [4]. Це підтверджує вірогідний зв'язок областей формування низькочастотних рекомбінаційних радіоліній вуглецю з хмарами нейтрального водню HI в Галактиці та має велике значення для подальшого дослідження проблем зореутворення, міжзоряної енергетики та інших питань фізики космосу.

[1] A.A.Konovalenko, L.G.Sodin, Nature, 294, 135 (1981).
[2] A.A.Konovalenko, S.V.Stepkin, EAS Publication Series 15, 271 (2005).
[3] V.V.Zakharenko, A.A.Konovalenko, P.Zarka et al. J. Astron. Instrum., 5, 1641010 (2016).
[4] P.M.W.Kalberla, W.B.Burton, Dap Hartmann et al., Astronomy and Astrophysics, 440, 775 (2005).

ХАРАКТЕРИСТИКИ І ПАРАМЕТРИ ПЕРЕНАПРУЖЕНОГО НАНОСЕКУНДНОГО РОЗРЯДУ МІЖ МІДНИМИ ЕЛЕКТРОДАМИ В АРГОНІ

М.І.Ватрала, А.О.Малініна, Р.В.Грицак, О.К.Шуаібов

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: vatrala2005@gmail.com

Дослідження перенапружених наносекундних розрядів в газах показали, що на їх основі можуть бути розроблені селективні «точкові» УФ-лампи на парах металів, а також можливо проводити осадження на діелектричну підкладку плівкових наноструктур оксидів міді, цинку і заліза в умовах інтенсивного опромінення підкладки і плівки бактерицидним УФ-випромінюванням [1]. Дані про дослідження умов синтезу плівкових наноструктур на основі перехідних металів з продуктів деструкції металевих електродів перенапруженого наносекундного розряду практично відсутні, тому актуальною є задача дослідження умов синтезу і основних характеристик таких наноструктур в інертних газах, яке можливе без застосування коштовного лазерного чи вакуумного обладнання.

В даній роботі приведені результати дослідження просторових, електричних і оптичних характеристик та параметрів плазми перенапруженого наносекундного розряду між електродами з міді в аргоні середнього тиску.

Дослідження характеристик перенапруженого наносекундного розряду проводилось на розрядному модулі, схема якого наведена в [2].

На рис.1 представлені усереднені за часом світлини перенапруженого наносекундного розряду при тисках p(Ar)=6,7 і 101 кПа, одержані з часовою витримкою ≈ 1 с при різних віддалях між електродами і різних тисках аргону.

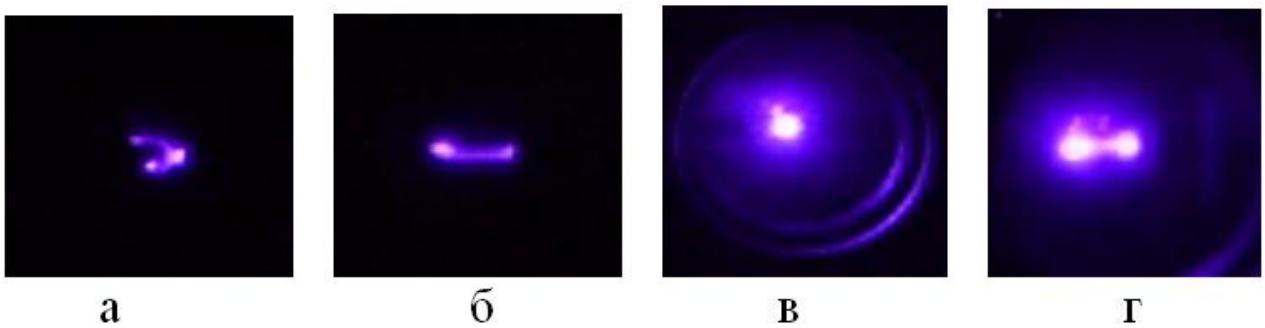


Рис.1. Світлини перенапруженого наносекундного розряду між мідними електродами в аргоні при таких умовах: **а** - p(Ar)= 6,7 кПа; d=2 мм; **в** - d=7 мм (б); p(Ar)= 101 кПа; **г** - d=2 мм і d=7 мм.

При середньому тиску аргону і d=2 мм розряд мав вигляд яскравої центральної частини діаметром близько 2 мм, рівним міжелектродній віддалі і ряду більш слабких струменів плазми, що відходили від центральної частини. При збільшенні віддалі між електродами до 7 мм найбільш яскрава частина

розрядної плазми концентрувалась біля вістря голок, які перемикались тонким менш яскравим плазмовим каналом. При збільшенні тиску аргону до 101 кПа об'єм плазми і яскравість світіння зростали, проте загальний вигляд світіння плазми в основному повторював його вигляд при p(Ar)= 6,7 кПа.

У спектрах випромінювання розряду на суміші аргону з парами міді в УФ-діапазоні довжин хвиль 214-306 нм спостерігалося випромінювання на переходах атома і однозарядного іона міді. Найбільш інтенсивною іонною спектральною лінією була лінія $\lambda = 224{,}70$ нм Cu II, а з атомарних - найінтенсивнішою була лінія з $\lambda = 226{,}20$ нм Cu I. Найінтенсивнішими в УФ-частині спектру були резонансні спектральні лінії з $\lambda = 324{,}75$ і 327,39 нм Cu I, у яких нижнім енергетичним рівнем є основний рівень. В УФ спектрі також спостерігались смуги другої додатної системи молекули азоту. В діапазоні довжин хвиль 360-659 нм спостерігалось випромінювання переважно на переходах Ar I; Ar II, а також інтенсивна спектральна лінія атома водню ($\lambda = 656{,}29$ H_α), яка зумовлена залишковим тиском повітря в камері після її відкачування форвакуумною помпою.

Встановлено, що при тиску аргону 6,7 кПа між електродами з міді, при міжелектродних віддалях 2 і 7 мм запалювався досить однорідний у просторі перенапружений наносекундний розряд з імпульсною електричною потужністю до 0.6 МВт, а енергетичний внесок в плазму за один імпульс досягав 30 мДж.

Дослідження параметрів плазми для умов експерименту встановило, що при міжелектродних проміжках 2 мм і 7 мм спостерігається зменшення значень як транспортних характеристик, так і потужності втрат на пружні і непружні процеси, а також констант збудження електронних рівнів атомів міді і аргону для міжелектродного проміжку 7 мм. Окрім того, встановлено, що для менших часів (60 нс) від початку пробою міжелектродного проміжку значення параметрів плазми були вищими по відношенню до більших часів (150 нс). Такі закономірності пов'язані зі зміною функцій розподілу електронів і значень ефективних перезів взаємодії електронів з атомами аргону і міді для розряду з різними міжелектродними проміжками, при яких діє різна приведена напруженість електричного поля.

Параметри плазми в парогазових сумішах аргону і міді можуть бути застосовані для уточнення механізму збудження атомів і іонів металів, а також удосконалення теоретичних моделей та розрахунків перетворення енергії зовнішнього джерела у випромінювання газопарових компонент у перенапруженому наносекундному розряді.

[1]. A. Shuaibov, A. Minya, A. Malinina, A. Malinin, R. Golomd, I. Shevera, Z. Gomoki and V. Danilo, Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology 9, 035018 (2018).

[2]. О.К. Шуаібов, А.О. Малініна, О.М. Малінін, Нові газорозрядні методи одержання селективного ультрафіолетового і видимого випромінювання та синтезу наноструктур оксидів перехідних металів. (Видавництво УжНУ «Говерла», Ужгород, 2019).

СПЕКТРАЛЬНІ ХАРАКТЕРТИСТИКИ ПЕРЕНАПРУЖЕНОГО НАНОСЕКУНДНОГО РОЗРЯДУ В ГАЗО-ПАРОВІЙ СУМІШІ «КИСЕНЬ-ЦИНК»

М.І.Ватрала, Р.В.Грицак, А.О.Малініна, О.О.Кудін, О.К.Шуаібов

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: vatrala2005@gmail.com

Приведено спектральні характеристики біполярного перенапруженого розряду наносекундної тривалості між електродами з цинку в кисні при тиску P = 101,3 кПа. У процесі мікровибухів неоднорідностей на робочих поверхнях електродів у сильному електричному полі в розрядний проміжок між електродами вносяться пари цинку. Це створює передумови для синтезу тонких острівкових плівок оксиду цинку, які можуть осаджуватись на діелектричній підкладці, встановленій поблизу центру розрядного проміжку. Крім цього, при застосуванні цинкових електродів перенапружений розряд атмосферного тиску випромінює переважно у спектральному інтервалі 200-250 нм [1], який знаходиться на межі пропускання повітря, і представляє інтерес до використання в медицині як бактерицидне джерело випромінювання. Одночасно з УФ- випромінюванням така плазма виступає і джерелом потоку наночастинок оксиду цинку, які мають антибактеріальними властивості.

Спектральні характеристики розряду досліджувались з центральної частини розрядного проміжку величиною 2 мм. Одержаний нами спектр випромінювання плазми представлений на рис. 1.

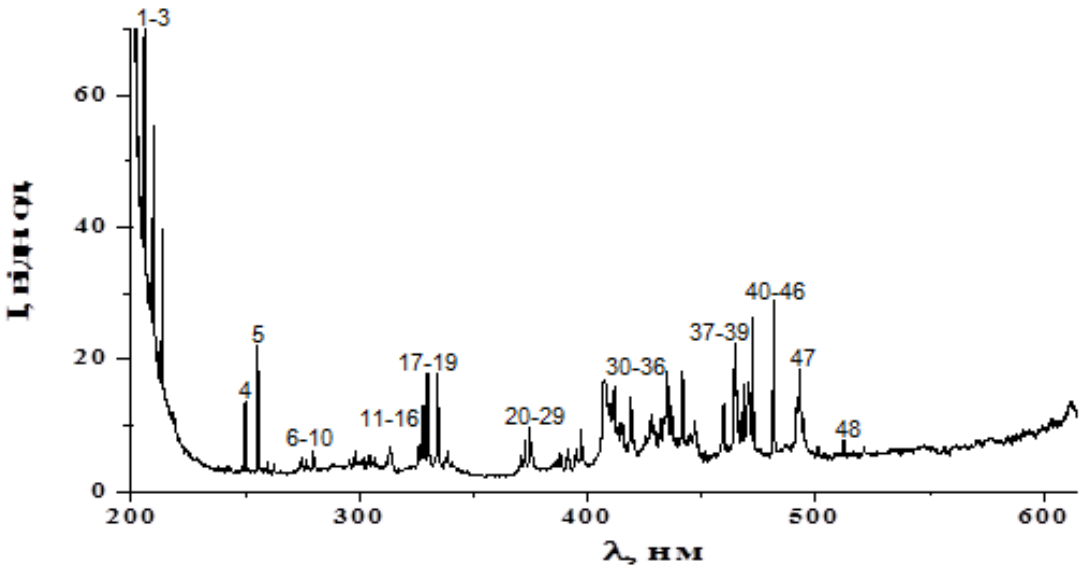


Рис. 1. Спектр випромінювання плазми перенапруженого наносекундного розряду в кисні ($p(O_2)$ = 101,3 кПа).

Таблиця

Найбільш інтенсивні спектральні лінії випромінювання плазми перенапруженого наносекундного розряду в кисні. Параметри розряду: $p(O_2)$ = 101,3 кПа; f = 40-150 Гц; електрична потужність розряду – 2-4 МВт; енергія в електричному імпульсі – 50-150 мДж).

№	λ, нм	$I_{експ.}$ відн. од	Об'єкт	$E_{нижн.}$, еВ	$E_{верх.}$, еВ	$Терм_{нижн}$	$Терм_{верх}$
1	206.20	72.52	Zn II	0	6.01	$3d^{10}4s$ $^2S_{1/2}$	$3d^{10}4p$ $^2P^0_{1/2}$
2	209.99	55.72	Zn II	6.11	12.02	$3d^{10}4p$ $^2P^0_{3/2}$	$3d^{10}4d$ $^2D_{5/2}$
3	213.85	39.54	Zn I	0	5.79	$3d^{10}4s^2$ $^1S_0$	$3d^{10}4s4p$ $^2P^0_1$
4	250.19	14.38	Zn I	6.01	10.96	$3d^{10}4p$ $^2P^0_{1/2}$	$3d^{10}5s$ $^2S_{1/2}$
5	255.79	22.59	Zn II	6.11	10.96	$3d^{10}4p$ $^2P^0_{3/2}$	$3d^{10}5s$ $^2S_{1/2}$
6	258.24	5.22	Zn I	4.02	8.82	$3d^{10}4s4p$ $^3P^0_1$	$3d^{10}4s6d$ $^3D_2$
7	267.05	3.33	Zn I	4.00	8.64	$3d^{10}4s4p$ $^3P^0_0$	$3d^{10}4s7s$ $^3S_1$

Методика, техніка і умови експерименту приведені в роботі [1]. Найбільш інтенсивні спектральні лінії випромінювання розряду наведені в таблиці. Як випливає з таблиці, основними в спектрі випромінювання плазми є спектральні лінії атома та однозарядного іона цинку з спектрального інтервалу 200-250 нм. Встановлено основні збуджені складові плазми паро-газової суміші на основі цинку і кисню при високих значеннях параметра E/N (де E – напруженість електричного поля; N - сумарна концентрація часток в плазмі, які при осадженні за межами розрядної плазми призводять до утворення тонких наноструктурованих плівок оксиду цинку). Осадження плівок оксиду цинку відбувається під постійною і автоматичною дією бактерицидного УФ-випромінювання плазми. Це, за даними роботи [2], де проводилась підсвітка УФ-випромінюванням підкладки з плівкою від окремої ртутної лампи, призводить до покращення електричних характеристик осадженої плівки, зокрема, до зменшення її опору.

[1] O.K. Shuaibov, O.Y. Minya, M.P. Chuchman, A.O. Malinina, O.M. Malinin, V.V. Danilo, Z.T. Gomoki, UJP, 63, 790 (2018).
[2] А.Х. Абдуев, А.Ш. Асваров, А.К. Ахметов, Р.М. Эмиров, В.В. Беляев Письма в ЖТФ. 43, вып.22, 40 (2017).

РОЗРАХУНОК ВЛАСТИВОСТЕЙ ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ АТОМІВ ФОСФОРУ ТА СІРКИ

О.В.Єгіазарян., В.Ю.Лазур, В.Ф.Гедеон, С.В.Гедеон., Н.Ю.Березницька

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: oksana.yehiazarian@uzhnu.edu.ua

Розвиток сучасної техніки експерименту (метод перехресних пучків, техніка збігів, застосування синхротронного випромінювання та ін.) відкрило нові можливості і перспективи дослідження електрон-атомних зіткнень. Значно розширилося коло досліджуваних атомних систем, підвищилася чутливість, точність і детальність вимірювань і, як наслідок, виявилося можливим отримати якісно нову інформацію про властивості взаємодіючих частинок та елементарних процесів з їх участю. Інтенсивні експериментальні дослідження електрон-атомних зіткнень протягом останніх десятиліть вказують на сильну залежність результатів вимірювань від індивідуальних особливостей структури атома-мішені і продуктів реакції. При цьому виявилося, що навіть в добре розроблених областях, таких, як резонансне та пружне розсіяння, є багато невирішених питань. До цих пір немає повної відповіді на вельми загальні питання про роль багатоелектронних кореляцій, поляризаційних явищ та ефектів зв'язку каналів і релаксації квантової орбіти збудженого електрона у процесах резонансного розсіяння повільних електронів на складних багатоелектронних атомах та іонах. У міру подальшого розвитку теорії розсіяння електронів на атомах ставало все більш очевидним, що прийшов час для розробки нових та удосконалення існуючих методів дослідження процесів e+A-розсіяння, які за своєю точністю задовольняють вимогам сучасного експерименту і найбільш ефективно та повно враховують тонкі деталі структури атома-мішені. Комбінація нових теоретичних підходів, нових обчислювальних методів, реалізація цих методів у вигляді відповідних пакетів прикладних програм – все це накладає відбиток на всю сучасну діяльність у цій області. Така діяльність виявилася плідною і для нашої дослідницької групи, в результаті чого в наших працях [1–3] було розроблено БСР-версію R-матричного методу.

У даній роботі проведено розрахунки енергетичної структури атомів фосфору і сірки за допомогою комбінованого методу БКХФ-БСР [1–5], що ґрунтується на концепції «стиснутого атома» та використанні базисних сплайнів і неортогональних орбіталей, які оптимізуються в незалежних розрахунках для індивідуальних термів.

За допомогою програмного коду БКХФ-БСР [6] в LS-наближенні нами обчислені одноелектронні орбіталі та енергії зв'язку 39 найнижчих спектроскопічних станів атома P з електронними конфігураціями $1s^22s^22p^63s^23p^3(^4S^o, {}^2D^o, {}^2P^o)$, $3s^23p^2(^3P)\,nl$ (n = 3, 4, 5, 6, l = 0, 1, 2), $3s^23p^2(^1D)\,nl$ (n = 4, l = 0, 1), $3s^23p^2(^1P)\,4s$ та $3s3p^4$ (^4P, ^2D, ^2S). Аналогічні розрахунки проведені і для 38 найнижчих станів атома S з електронними конфігураціями

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4\,(^3P,\,^1D,\,^1S)$, $3s^2 3p^3(^4S^o)\,nl$ (n = 3, 4, 5, 6, l = 0, 1, 2), $3s^2 3p^3(^2D^o)\,nl$ (n = 4, l = 0, 1), $3s^2 3p^2(^2P^o)\,4s$ та $3s3p^5\,(^{3,1}P^o)$. Для контролю точності побудованих хвильових функцій атомів фосфору та сірки обчислено також сили осциляторів для найважливіших одно- та двоелектронних переходів. Досягнута при цьому точність становить ~0.05-0.2 еВ для нижніх енергетичних рівнів.

Порівняння розрахованих нами енергій зв'язку та сил осциляторів з наявними експериментальними даними вказує на високу ефективність та точність розширеної BSR-версії *R*-матричного методу [1-5]. Розраховані нами енергії зв'язку та хвильові функції будуть використовуватись в подальшому при дослідженні елементарних процесів взаємодії повільних електронів з атомами P і S та фотонів з від'ємними іонами P^- і S^-.

[1] O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, V. Lazur, Phys. Rev. A. 74, 052708 (2006).
[2] O. Zatsarinny, K. Bartschat, L. Bandurina, S. Gedeon, J. Phys. B. 40, 4023 (2007).
[3] O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy, Phys. Rev. A. 79, 052709 (2009).
[4] V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy, O. Zatsarinny, K. Bartschat, Phys. Rev. A. 85, 022711 (2012).
[5] V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy, O. Zatsarinny, K.Bartschat, Phys.Rev. A. 89, 052713 (2014).
[6] O. Zatsarinny, Comput. Phys. Commun. 174, 273 (2006).

NEAR-FIELD FUNDAMENTALS AND APPLICATIONS OF PHOTONIC ANISOTROPIC METASURFACES

O.Yermakov

Department of Computer Physics, V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv
e-mail: oe.yermakov@gmail.com

The light control principles remain almost unchanged during last two centuries. However, in the modern era of miniaturization, conventional optical devices including lenses, mirrors, filters, polarizers, become too thick, fundamentally and functionally limited. It emphasizes the emergence of a new area of resonant photonics which uses subwavelength and multi-functional structures overcoming the limits of classical physics to manipulate light.

This research focuses on the study of resonant metasurfaces which are two-dimensional periodic arrays of the subwavelength scatterers engineered for the efficient light control. A major part of works devoted to metasurfaces is concentrated on far-field applications considering metasurfaces as plane wave transformers (reflectors, refractors, absorbers, polarizers, antennas, etc.). However, in this work we investigate near-field properties for the efficient light manipulation over a surface that is of high importance for optical computers, integrated circuits, on-chip devices, sensors and other planar technologies. Obviously, the latter requires tunable control over highly localized electromagnetic fields. The strong interaction of light with matter leads to the formation of a new hybrid state – surface plasmon-polariton which is a perfect candidate for the carrier of localized field.

In this work, we explore resonant anisotropic metasurfaces representing new platform allowing one to achieve simultaneous control over surface plasmon-polaritons propagation regime, routing and polarization. Namely, we study the localized eigenmode spectrum of the resonant anisotropic metasurfaces through the developed effective surface conductivity approach [1, 2]. We discover new type of surface waves at the metasurfaces with hyperbolic dispersion, known today as ‘hyperbolic plasmon-polaritons’ [1]. Hyperbolic plasmon-polaritons exhibit a number of propagation regimes [3]. Besides, we investigate tunable polarization control of surface waves localized at anisotropic metasurfaces, namely we engineer the orientation of the spin angular momentum on demand in the near-field [4], discover the polarization degree of freedom for localized light [5]. In addition, we conduct the classification of polarization states for surface waves localized at anisotropic metasurfaces [6]. The theoretical results of surface waves investigation have been confirmed experimentally in the optical [1, 3] and microwave [7] frequency ranges.

Finally, we show the great performance in the controlling the photonic spin Hall effect with hyperbolic metasurfaces [8, 9] and the light coupling into the optical fiber empowered by an axial-symmetric metasurface [10].

To conclude, we consider this work as a significant milestone towards the development of planar photonic and flat-optics devices.

[1] O. Y. Yermakov et al., Phys. Rev B 91, 235423 (2015).
[2] O. Y. Yermakov et al., Sci. Rep. 8, 14135 (2018).
[3] A. Samusev et al., Opt. Express 25, 32631 (2017).
[4] O. Y. Yermakov et al., Phys. Rev B 94, 075446 (2016).
[5] O. Y. Yermakov, A. A. Bogdanov, A. V. Lavrinenko, IEEE J. Sel. Top. Quant. Electron. 25, 1 (2019).
[6] O. Yermakov, A. Bogdanov, IEEE Ukrainian Microwave Week (UkrMW), 559 (2020).
[7] O. Y. Yermakov et al., Phys. Rev B 98, 195404 (2018).
[8] O. Takayama et al., Opt. Lett. 43, 4602 (2018).
[9] M. Mazanov et al., Quant. Rep. 2(4), 489-500 (2020).
[10] O. Yermakov et al., ACS Photonics 7(10), 2834-2841 (2020).

ПРО РЕЛЯТИВІСТСЬКІ РІВНЯННЯ РУХУ ПЕРШОГО ПОРЯДКУ ДЛЯ ЕЛЕМЕНТАРНОЇ ЧАСТИНКИ ЗІ СПІНОМ 3/2

І.І.Вийконь, В.М.Симулик

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: ilonanyitray@gmail.com

Адрони зі спіном 3/2 давно відомі в фізиці елементарних частинок, зокрема, існує мультиплет Δ-баріонів, або Δ-резонансів (Δ^{++}, Δ^{+}, Δ^{0}, Δ^{-}), що складаються з трьох кварків типу u і d. Ω^{-} гіперон складається з трьох дивних кварків (sss) і має час життя 10^{-10} с. Принципово інший фізичний приклад виникає в суперсиметричних теоріях – це гравітіно, що є суперпартнером гравітона. Однак на відміну від *гіперонів* (баріонів зі спіном 3/2) суперпартнери не є експериментально спостережуваними. Тай сам по собі гравітон викликає значно більше запитань, аніж існуючих чітких відповідей.

Слід особливо зауважити, що теоретичний опис елементарних частинок спіну 3/2 в рамках теорії поля до цих пір має справу з низкою принципових проблем, що характерно для всіх полів з вищими спінами, які більші за s=1. Основні проблеми породжуються тим, що, окрім компонент, які відносяться до спіну s=3/2, відповідне квантове поле має також *зайві компоненти*.

Існуючі релятивістські рівняння першого порядку для опису руху елементарної частинки зі спіном s=3/2 умовно можна поділити на дві групи. Перша група – це частинний випадок відповідних *рівнянь для довільного спіну*. Друга група – це рівняння спеціально призначені для опису властивостей елементарної частинки зі спіном s=3/2.

Найбільш відомими серед рівнянь першої групи є рівняння Баба [1–3] та Баргмана–Вігнера [4, 5].

Рівняння Баба відоме з роботи [1] (див. також [2]). Це матрично-диференціальне рівняння у частинних похідних першого порядку має загальну форму запису для довільного спіну, але для кожного конкретного значення спіну основні матриці мають різні явні вигляди, які залежать від різних явних виглядів генераторів алгебри Лі відповідного представлення групи Лоренца. Кількість компонент хвильової функції також різна для різних значень спіну. У роботі [3] Баба розписав частинний випадок, коли s=3/2, і особисто довів, що у цьому випадку його рівняння співпадає з рівнянням Раріти–Швінгера, яке проаналізовано нижче. Зокрема, хвильова функція має 16 компонент.

Рівняння Баргмана–Вігнера [4], як очевидно. наприклад, із [5], є рівнянням Дірака у просторах довільних розмірностей, у яких визначені гамма матричні представлення алгебри Кліффорда над полем комплексних чисел. Розмірність таких просторів $2s\times4$, тобто для s=3/2 хвильова функція матиме 12 компонент.

Рівняння Паулі–Фірца. Автори [6] описують як поле довільного спіну, так і частинні випадки, коли спіни мають значення 3/2 та 2. Для опису випадку цілого спіну використовуються тензори, а для напівцілого – спінори.

Інші рівняння для довільного спіну використовуються рідше (див., огляд у [7] та посилання там).

Рівняння Раріти–Швінгера для частинки з довільним напівцілим спіном. Введено в розгляд принципово новий об'єкт, що має чотири *спінорні індекси* та додаткові індекси, які задають *симетричний тензор* довільного рангу k. Саме такий об'єкт виступає як хвильова функція у рівнянні [8]. Це певне поєднання двох різних елементів формалізму Паулі–Фірца [6] з метою його спрощення. Для $k=0$ маємо звичайне рівняння Дірака, при k=1 – 16-компонентне рівняння для частинки зі спіном 3/2, яке має певне відношення до опису властивостей ферміонів зі спіном 3/2 лише після накладання додаткових умов. Саме таке рівняння є найбільш поширеним і називається рівнянням *Раріти–Швінгера для частинки зі спіном* 3/2 [8]. Окрім «боротьби» із зайвими компонентами природно виникають проблеми з трансформаційними властивостями 16-компонентного *вектора-спінора*, причинністю і релятивістською інваріантністю (див., наприклад, [9]).

Рівняння Фіск–Таіта для частинки зі спіном 3/2 – це 24-компонентне діракоподібне рівняння [10], де хвильова функція є *антисиметричним тензор-спінором* групи Лоренца. Рівняння введено у розгляд з метою подолання труднощів [8, 9], що вдалося лише частково і досить умовно. Рівняння критикують [11] за подвоєння парності і наявність негативної енергії.

Сьогодення. Покращення цих моделей все ще актуально (див., напр. [12]).

Рівняння без зайвих компонент введено у розгляд у [13, 14] на основі старту з *релятивістської канонічної квантової механіки*. Хвильова функція *дублета частинка-античастинка* зі спіном s=3/2 містить лише *8 компонент*. Це рівняння для s=3/2 є частинним випадком відповідного формалізму для довільного спіну [7]. Рівняння *ab initio* має принципові переваги у порівнянні з розглянутими вище моделями і перспективи широкого застосування у фізиці високих енергій та ядерній фізиці.

[1] H.J. Bhabha, Curr. Sci. 14, 89 (1945).
[2] H.J. Bhabha, Rev. Mod. Phys. 17, 200 (1945).
[3] H.J. Bhabha, Proc. Indian Acad. Sci. A. 34, 335 (1951).
[4] V. Bargman, E.P. Wigner, Proc. Nat Acad. Sci. USA. 34, 211 (1948).
[5] D.L. Pursey, Nucl. Phys. 53, 174 (1964).
[6] M. Fierz, W. Pauli, Proc. R. Soc. Lond. A 173, 211 (1939).
[7] V. Simulik, Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory of Arbitrary Spin (Nova Science, New York, 2020, 343 p.).
[8] W Rarita, J. Schwinger, Phys. Rev. 60, 61 (1941).
[9] K. Johnson, E.C.G. Sudarshan, Ann. Phys. (N.Y.) 13, 126 (1961).
[10] C. Fisk, W Tait, J. Phys. A: Math. Nucl. Gen. 6, 383 (1973).
[11] M.A.K. Khalil, M. Seetharaman, Phys. Rev. D. 18, 3040 (1978).
[12] J. Kristiano, S. Clymton, T. Mart, Phys. Rev. C. 96, 052201(R) (2017).
[13] V.M. Simulik, Ukr. J. Phys, 60, 985 (2015).
[14] V.M. Simulik, J. Phys: Conf. Ser. 670 012047 (2016).

ВПЛИВ ДЕФЕКТІВ НА ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІВ $CuInP_2S_6$

А.Гайсак, Д.Гал, О.Молнар

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: andrii.haisak@uzhnu.edu.ua

При дослідженні діелектричних властивостей кристалів $CuInP_2S_6$ було встановлено, що як температура фазового переходу, так і деякі властивості кристалів, отриманих методом ХТР, істотно змінюються від партії до партії. Це очевидно обумовлено відхиленням від стехіометрії. Найбільш імовірною причиною цього явища скоріше за все може бути велика різниця у швидкості процесу переносу маси міді та індію. Тому, з метою оптимізації властивостей цих кристалів нами досліджувалися зразки, які були вирощені методом ХТР, як з шихти стехіометричного складу, так і складу $0.9{\cdot}CuInP_2S_6$ - $0.1{\cdot}Cu_2S$ з відхиленням від стехіометрії у сторону Cu_2S і $0.9{\cdot}CuInP_2S_6$ - $0.1{\cdot}In_2S_3$ в сторону In_2S_3, що передбачає збагачення одержуваних кристалів міддю і індієм, відповідно. За формою і максимальним значенням діелектричної аномалії при сегнетоелектричному фазовому переході можна судити про ступінь досконалості досліджуваних кристалів. Нами проведені дослідження діелектричних властивостей кристалів, отриманих методом Бріджмена в порівнянні з кристалами, отриманими ХТР з шихти вище згадуваних складів.

Різкий стрибок ε' при нагріванні, обумовлений фазовим переходом першого роду, в кристалі, який був отриманий методом ХТР з шихти стехіометричного складу, спостерігається при температурі 311.3 К, що дуже близько до величини T_c, в кристалі вирощеному методом Бріджмена 312.0 К. Піки ε'(T) практично збігаються по температурі в обох типах кристалів. Температурний гістерезис фазового переходу для обох зразків становив ~ 1 К.

В кристалах, отриманих з шихти збагаченої сульфідом індію, фазовий перехід зміщений в область більш високих температур (T_c = 319.8К) по відношенню до кристалу, отриманого з шихти стехіометричного складу. У той же час як у кристалі, вирощеному з шихти з надлишком сульфіду міді фазовий перехід спостерігається при більш низьких температурах T_c = 305.3 К. Максимум діелектричної проникності в цьому кристалі значно вище і форма аномалії «більш гостра». У зразку, отриманому при високій концентрації носія CuJ фазовий перехід відбувається практично при тій же температурі, що і в кристалах, вирощених з шихти, збагаченої Cu_2S. Однак, слід зазначити, що пік ε'(T) в цьому зразку більш розмитий.

Для зразків, отриманих зі стехиометричної шихти і збагаченої Cu_2S, залежність 1/ε'(T) в широкому температурному інтервалі підкоряється

лінійному закону з постійною Кюрі-Вейса C ≈ 6.6×10^3 K^{-1}. Відхилення від закону Кюрі-Вейса має місце в інтервалі в декілька К вище T_c. В зразку, отриманому з шихти з надлишком сульфіду індію, постійна Кюрі-Вейса складає C ≈ 4.5×10^3 K^{-1}. Це значення близьке до величини C ≈ 4.7×10^3 K^{-1}, отриманому для даних кристалів, в роботі [1]. Судячи із ступеню розмиття діелектричної аномалії, її температурного положення і максимального значенню ε в кристалі $CuInP_2S_6$, вирощеному з розплаву, можна зробити висновок, що ці кристали можна порівняти за якістю з кристалами, отриманими з газової фази з шихти стехіометричного складу.

На підставі вище наведених результатів можна якісно пояснити залежність температури фазового переходу в кристалах $CuInP_2S_6$ від ступеня їх стехіометрічності. Той факт, що фазовий перехід відбувається при більш високих температурах і аномалія діелектричної проникності більша в кристалах, отриманих з надлишком Cu_2S, свідчить про те, що скоріше за все, в кристалах вирощених зі стехіометричного складу є вакансії міді. В кристалах, отриманих з шихти з надлишком In_2S_3, мабуть, ступінь нестехіометрічності по міді ще більше зростає. Таким чином, можна вважати, що при надлишку сульфіду міді у вихідному для росту кристалів сировині, одержувані кристали володіють більш досконалою структурою. І навпаки, збільшення вмісту сульфіду індію в шихті призводить до збільшення концентрації дефектів кристалічної решітки - а саме вакансій міді. Що стосується випадку кристалів, отриманих при високих концентраціях транспортуючого агенту, то очевидно, тут ситуація така ж, як і в випадку зразків отриманих з шихти, збагаченої Cu_2S: за рахунок надлишкової міді, що міститься в транспортному агенті, відбувається «заліковування» вакансій міді. Розмиття фазового переходу, ймовірно, пов'язано з впровадженням йоду в міжшаровий простір. В результаті цього кристали приймають оранжеве забарвлення.

Виходячи з того факту, що виникнення сегнетоелектричної поляризації в $CuInP_2S_6$ переважно зумовлено різницею в заселенні іонами міді двох нееквівалентних нецентральних позицій в кристалічній решітці [2], вакансії міді можуть розглядатися як м'які дефекти що можуть переорієнтуватись, і які, як відомо, зміщують фазовий перехід в область більш високих температур. Такий якісний висновок добре узгоджується ситуацією, яка спостерігається на експерименті.

[1] A. Simon, J. Ravez, V. Maisonneuve, C. Payen, V.B. Cajipe, Chemistry of Materials 6, 1575 (1994).
[2] V. Maisonneuve, M. Evain, C. Payen, V.B. Cajipe, P. Molinié, Journal of Alloys and Compounds 218, 157 (1995).

ДОСЛІДЖЕННЯ ПЕРЕРІЗУ ФОТОЯДЕРНОЇ РЕАКЦІЇ ^{122}Te(γ,n)^{121}Te У РАЙОНІ ГІГАНТСЬКОГО E1-РЕЗОНАНСУ

З.М.Біган, П.С.Деречкей, В.М.Мазур, О.М.Поп

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: root2106@gmail.com

Підйом інтересу до дослідження фотоядерних реакцій в області енергій гамма-квантів 10–20 МеВ, що спостерігається в останній час, пов'язаний з необхідністю одержання даних про перерізи фотоядерних реакцій, необхідних, наприклад, для астрофізичних обчислень.

До теперішнього часу переріз реакції ^{122}Te(γ, n)^{121}Te не досліджувався. У зразках природного телуру вміст легких ізотопів ^{120}Te, ^{122}Te дуже низький: ^{120}Te - 0.09 %, ^{122}Te - 2,4 %, що робить збагачення цих ізотопів важкою і високовартісною проблемою. Відсутність високозбагачених мішеней з легких ізотопів телуру і була тією причиною, чому фотонейтронні перерізи на них не вивчалися раніше ні у початкових дослідженнях, див. [1], ні у послідуючих.

У даній роботі представлено результати дослідження виходів і розрахунку перерізу реакції ^{122}Te(γ, n)^{121}Te для області енергій гігантського дипольного резонансу активаційним методом. Показано, що одержаний переріз реакції має одногорбий характер з максимумом при енергії ~15.3 МеВ. Експериментальні результати порівнюються з теоретичними розрахунками, виконаними за допомогою програмного пакету TALYS-1.9. Для дослідженої (γ, n) реакції встановлено домінування статистичного механізму.

Вимірювання проводилося на пучку гальмівних гамма-квантів мікротрона М-30 в області 10-20 МеВ з кроком ΔE=0.5 МеВ. В експерименті використовувалася фотоактиваційна методика. В результаті були одержані безпосередньо відношення повних виходів нейтронів для ізотопу ^{122}Te(Y_1) до виходу нейтронів для ізотопу ^{130}Te(Y_2), який використовувався для нормування і калібрування виходу реакції ^{122}Te(γ,n)^{121}Te.

Наявність експериментальних залежностей відношення виходів $Y_1/Y_2 = f(E_{\gamma max})$ дозволяє також, використовуючи переріз реакції ^{130}Te(γ,n)^{129}Te виміряний раніше, розрахувати переріз реакції ^{122}Te(γ,n)^{121}Te. Такий розрахунок проводився методом оберненої матриці з кроком 1 МеВ. Переріз апроксимувався методом найменших квадратів кривими Лоренца: $\sigma(E)= (\sigma_0 E^2\Gamma_0^2)/[(E-E_0^2)^2+ E^2\Gamma_0^2]$, де σ_0, E_0, Γ_0 – параметри. В результаті підгонки одержані наступні значення параметрів: σ_0=(274,1±2,1) мб, E_0=(15.27±0.10) МеВ, Γ_0=(4.76±0,08) МеВ.

[1] A.Lepretre, H. Beil, R. Bergere et al. Nucl. Phys., 258, 350 (1976).

КОМПОЗИЦІЙНІ МАТЕРІАЛИ З ПОРОШКОВИМ МЕТАЛОВМІСНИМ НАПОВНЮВАЧЕМ ДЛЯ ЗАХИСТУ ВІД НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

В.Іванов, Е.Клюєв, Є.Степаненков

Інститут геотехнічної механіки ім. М.С. Полякова НАН України, Дніпро
e-mail: eduard.igtmnanu@gmail.com

На сьогоднішній день проблема поводження з радіоактивними відходами, які утворюються на всіх стадіях ядерно-паливного циклу, є однією з найважливіших у промисловому виробництві атомної енергії. Такі техногенні середовища є радіоактивними, оскільки атоми в них нестабільні і у процесі трансформації у стабільний стан спонтанно випускають іонізуюче випромінювання, яке може мати потенційно шкідливі наслідки. Цим і зумовлена важливість безпечного поводження з відходами для захисту навколишнього середовища та недопущення того, щоб ця проблема постала в майбутньому перед наступними поколіннями [1,2].

Серед цілого комплексу заходів системи радіаційної безпеки одним з головних є створення радіаційно-захисних покриттів і конструкцій. Метою радіаційного захисту є попередження соматичних і зведення до мінімуму генетичних наслідків, зумовлених шкідливим впливом зовнішнього і внутрішнього радіаційного опромінення як окремих працівників, так і населення в цілому, під час використання, зберігання і перевезення радіоактивних речовин, експлуатації ядерних реакторів, рентгенівських апаратів та інших джерел радіації.

Раніше проведеними дослідженнями [3,4] встановлено, що дисперсні середовища за певних умов аномально сильно послаблюють проникаючу здатність рентгенівського і гамма-випромінювання, що обумовлено самоорганізацією дисперсних частинок розміром від тисячних до сотень мікронів в енергетично взаємопов'язані радіаційно-поглинаючі ансамблі. На підставі зазначеної властивості розроблено процес та виготовлено в лабораторних умовах зразки радіаційно-захисних матеріалів із використанням порошкових металовмісних наповнювачів.

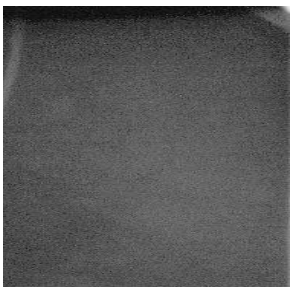
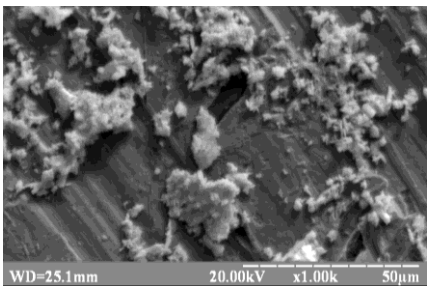
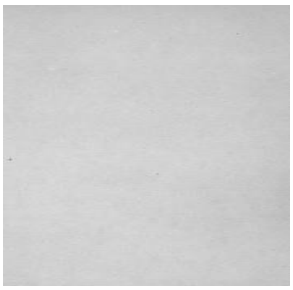
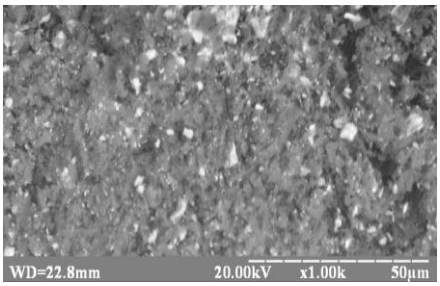
Порошкові наповнювачі вводять до складу матриць-матеріалів, наприклад, пластичних мас, гум, клеїв, герметиків, лакофарбових матеріалів, з метою підвищення захисних властивостей, модифікації експлуатаційних властивостей, а також зниження їх вартості [3,4].

Метою представленої роботи було вивчення властивостей та особливостей поведінки нових радіаційно-захисних матеріалів для усунення шкідливого низькоенергетичного випромінювання за рахунок використання порошкових (рідкоземельних елементів) металовмісних наповнювачів з наступним утворенням міцних фазових контактів.

В результаті виконаних експериментальних досліджень властивостей композиційних матеріалів встановлено, що збільшення перерізу взаємодії

короткохвильового випромінювання з композиційним матеріалом відбувається за рахунок зростання кількості ультрадисперсних частинок наповнювача. З використанням електронної мікроскопії досліджено ефективність руйнування агломератів з наступним розподілом їх в об'ємі матриці (табл. 1).

Таблиця 1 – Вплив структури композиційного матеріалу на його радіаційно-захисні властивості

	Негатив зразка	Свинцевий еквівалент, мм	Структура композиційного РЗ матеріалу у відбитих електронах (х1 000)
Наповнювач у стані «поставки»		0,50 (± 0,05)	
Наповнювач у матриці		0,70 (± 0,05)	

Таким чином, співрозмірність розмірів частинок в ультрадисперсних середовищах і довжини хвилі випромінювання обумовлює ефективне розсіювання, що можна трактувати як прояв нового специфічного механізму взаємодії рентгенівського випромінювання з ультрадисперсними середовищами. Кут відхилення випромінювання від початкового напрямку може бути досить помітним у випадку великої концентрації ультрадисперсних частинок радіаційно-захисного наповнювача. Проходження низькоенергетичного випромінювання крізь ультрадисперсні частинки призводить до ефективного збільшення оптичної довжини шляху фотонів у середовищі і, як наслідок, до додаткового розсіювання.

[1] В.М. Пишнів, УРЖ 10, 24 (2002).
[2] О. Токаревський, С. Кондратьєв, З. Алєксєєва, Н. Рибалка, ЯРБ 4, 24 (2015).
[3] И. Асаенок, А. Навоша Радиационная безопасность: учеб. пособие, Минск: Бестпринт, 105, (2004).
[4] А. Булат, В. Иванов, К. Голов, В. Ткаченко, Е. Степаненков, Вісник Національного технічного університету «ХПІ» 49 , 6 (2015).

ПАРАМЕТРИ ГАЗОРОЗРЯДНОЇ ПЛАЗМИ НА СУМІШІ ПАРІВ ДИЙОДИДУ, ДИБРОМІДУ І ДИХЛОРИДУ РТУТІ З ГЕЛІЄМ

А.О.Малініна, К.Б.Молнар

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: mkrisz14@gmail.com

Газорозрядна плазма на суміші парів дийодиду, дибромiду і дихлориду ртуті з газами є робочим середовищем ексиплексних джерел когерентного і спонтанного випромінювання спектральних смуг на довжинах хвиль у максимумі інтенсивності (λ) 444 нм, 502 нм і 557 нм. Інтерес до дослідження таких джерел випромінювання викликаний їх перспективністю для створення ексилампи, що одночасно випромінює смуги в спектральному діапазоні найбільшої чутливості рослин. Мета досліджень полягала в тому, щоб визначити параметри газорозрядної плазми на сумішах парів дийодиду, дибромiду і дилориду ртуті з гелієм, встановити фізико-хімічні закономірності в їх залежностях від приведеної напруженості електричного поля і на основі їх виявити можливість підвищити енергетичні параметри випромінювачів. Параметри плазми визначалися для значень приведеної напруженості електричного поля в діапазоні 1–200 Тд у суміші дигалогенідів ртуті: $HgBr_2$: HgI_2: $HgCl_2$: He = 0.0024 : 0.0012 : 0.00816 : 0.9951 при загальному тиску суміші P = 110.7 кПа. Для їх визначення застосовувалася методика, яка описана в статті [1].

На рис. 1 приведено характерний вигляд функцій розподілу електронів за енергіями при зміні приведеної напруженості електричного поля (E/N) в діапазоні 1–200 Тд. Збільшення її величини призводить до зростання кількості «швидких» електронів в розряді. Середня енергія електронів розряду різко збільшується від 0.31 до 2.3 еВ при підвищенні E/N від 1 до 7.8 Тд. При подальшому зростанні приведеного електричного поля швидкість збільшення середньої енергії електронів сповільнюється і досягає значення 24.2 еВ для E/N = 200 Тд.

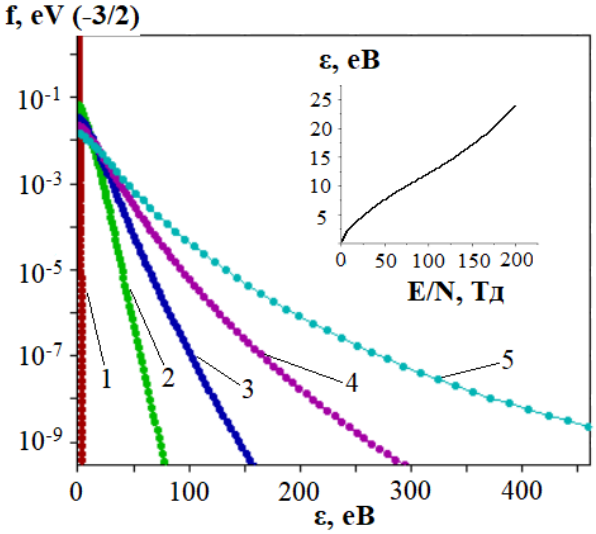


Рис. 1. Функції розподілу електронів за енергіями для суміші: $HgBr_2$: HgI_2: $HgCl_2$: He = 0.0024 : 0.0012 : 0.00816 : 0.9951 при загальному тиску суміші P = 110.7 кПа для значень параметру E/N: 1 (1), 50.8 (2), 100 (3), 150 (46), 200 (5) Тд; на вставці – залежність середньої енергії електронів від параметру E/N.

Розподіл питомих втрат потужності розряду на основні процеси представлено на рис. 2. Частка питомої потужності розряду, що йде на процеси дисоціативного збудження ексиплексних молекул монобромiду, монойодиду і монохлориду ртуті збільшується із зростанням E/N. Вона досягає максимуму 11.4%, 29.5%, 40.7%, 4.9% і 3.1% при значеннях параметра E/N рівних 14.7 Тд, 7.8 Тд , 26.1 Тд , 15 Тд і 15 Тд для електронних станів монобромiду ртуті $B^2\Sigma^+_{1./2}$, $X^2\Sigma^+_{1/2}$, дибромiду ртуті ($HgBr_2$ (D)) і $B^2\Sigma^+_{1./2}$ – стану монойодиду ртуті та монохлориду ртуті відповідно, а при подальшому підвищенні параметра E/N вона зменшуються.

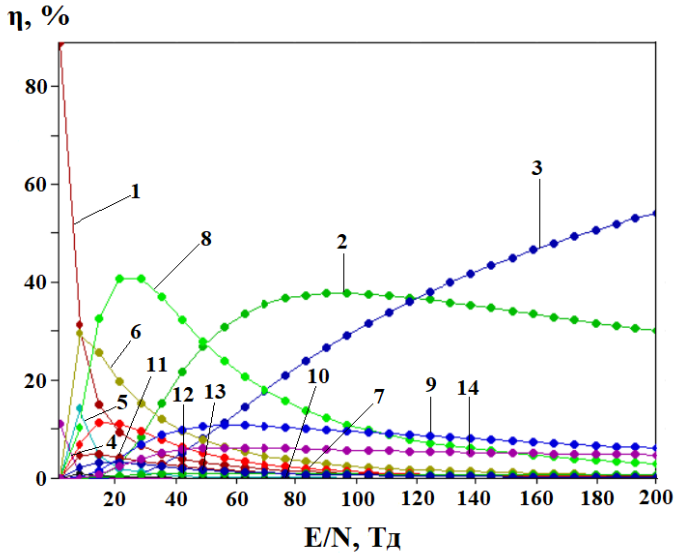


Рис. 2. Залежність питомих втрат потужності розряду на процеси зіткнень електронів в суміші парів дибромiду та дийодиду ртуті з гелієм від приведеної напруженості електричного поля (E/N): 1 – пружне розсіювання електронів атомами гелію, 2 – збудження атомів гелію, 3 – іонізація атомів гелію, 4 – коливальне збудження молекул $HgBr_2$, 5 – резонансне коливання молекул $HgBr_2$, 6 – дисоціативне збудження $X^2\Sigma^+_{1/2}$ станів молекул HgBr, 7 – дисоціативне збудження $B^2\Sigma^+_{1/2}$ стану молекул HgBr, 8 – дисоціативне збудження електронного стану дибромiду ртуті ($HgBr_2$ (D)), 9 – іонізації молекул дибромiду ртуті, 10 – прилипання електронів до молекул дибромiду ртуті, 11 – дисоціативне збудження стану $B^2\Sigma^+_{1/2}$ молекул HgI, 12 – іонізацію молекул дийодиду ртуті, 13 – дисоціативне збудження стану $B^2\Sigma^+_{1/2}$ молекул HgCl, 14 – іонізацію молекул дихлориду ртуті.

В результаті досліджень були встановлені значення приведеної напруженості електричного поля, для яких питомі втрати потужності розряду максимальні. Їх застосування в ексиплексних випромінювачах дозволить збільшити потужність випромінювання і коефіцієнт корисної дії.

[1] А.О. Малініна, О.К. Шуаібов, Журнал фізичних досліджень 24, 1401 (2020).

МАТРИЧНИЙ ЕЛЕМЕНТ ПЕРЕДАЧІ КВАНТОВОЇ ІНФОРМАЦІЇ ВІД ОДНОГО ДВОРІВНЕВОГО АТОМА ДО ІНШОГО

С.М.Кузьма, В.Ю.Лазур, О.К.Рейтій, В.В.Рубіш

ДВНЗ "Ужгородський національний університет", Ужгород
e-mail: kuzma.svitlana@student.uzhnu.edu.ua

Одною з основних фізичних проблем, пов'язаних з реалізацією ідеї квантового комп'ютера і квантових обчислень, слід виділити пошук фізичних процесів, що виконують логічні операції [1]. У роботах [2,3] було запропоновано принцип дії квантового комп'ютера на основі електричних дипольних переходів у спектрі дворівневих атомів, що селективно взаємодіють з короткими інтенсивними оптичними імпульсами.

Стандартною моделлю для опису процесів резонансної передачі квантової інформації на довільні відстані слугує система з двох однакових дворівневих атомів, один з яких опромінюється полем реальних фотонів. Вивчення різних режимів динаміки такої модельної системи при її взаємодії з полем реальних фотонів може послужити основою для створення елементної бази квантових комп'ютерів. Елегантне теоретичне доведення принципової можливості передачі квантової інформації від одного дворівневого атома до іншого було дано в [2,4].

Резонансна взаємодія виникає між збудженим атомом і атомом, що знаходиться в основному стані, якщо енергія переходу у збуджений стан в обох атомах однакова. Подібна ситуація завжди має місце при взаємодії двох однакових дворівневих атомів.

Стандартне квантово-механічне обчислення енергії резонансної взаємодії двох тотожних атомів (див. [4]) стає, однак, непридатним на достатньо великих, порівняно з характерними довжинами хвиль λ_0 у спектрах взаємодіючих атомів, міжатомних відстанях R.

Послідовна теорія резонансної взаємодії атомів, що знаходяться на довільних відстанях один від одного, поряд з миттєвою кулонівською взаємодією повинна враховувати також і запізнюючу взаємодію атомів, залежну від швидкості світла c. Такий загальний розгляд було проведено в роботах [5–9]. Побудований в них узагальнений оператор електричної диполь-дипольної взаємодії двох нейтральних атомів, що знаходяться на довільній відстані один від одного, має вигляд:

$$V_{\text{дип}}^{(\pm)} = \exp\left(\frac{i}{c}\omega_0 R\right)\left\{\frac{\vec{d}_1\vec{d}_2 - 3(\vec{n}_R\vec{d}_1)(\vec{n}_R\vec{d}_2)}{R^3} \pm \frac{e}{2mc}\left[\left\{\frac{\vec{d}_1\vec{p}_2 - 3(\vec{n}_R\vec{d}_1)(\vec{n}_R\vec{p}_2)}{R^2} - \right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left. - \frac{\vec{p}_1\vec{d}_2 - 3(\vec{n}_R\vec{p}_1)(\vec{n}_R\vec{d}_2)}{R^2}\right]\right. - \frac{e^2}{m^2c^2}\frac{\vec{p}_1\vec{p}_2 - (\vec{n}_R\vec{p}_1)(\vec{n}_R\vec{p}_2)}{R}\right\}, \qquad (1)$$

де $e = -|e|$ і m – маса і заряд електрона, $\vec{n}_R = \vec{R}/R$ – одиничний вектор у напрямку між'ядерної осі $\vec{R}$, $\omega_0 = (E_n - E_0)/\hbar$ – резонансна частота переходу у

спектрі дворівневих атомів, $\vec{d}_1 = e\vec{r}_1$ і $\vec{d}_2 = e\vec{r}_2$ – оператори електричних дипольних моментів окремих атомів, $\vec{r}_1$ і $\vec{r}_2$ – радіус-вектори відносно ядер, а $\vec{p}_1$ і $\vec{p}_2$ – оператори імпульсів 1-го та 2-го атомних електронів відповідно.

Ми розглядаємо систему двох тотожних атомів, що знаходяться на довільній відстані *R* один від одного. У кожному атомі нас цікавитиме лише перехід між однією і тією ж парою рівнів. Наявності в атомної квантової системи двох виділених внутрішніх базисних станів та принципу суперпозиції цілком достатньо для зберігання одного біта квантової інформації – кубіта.

Для системи двох взаємодіючих дворівневих атомів оператор Гамільтона $\hat{H}$ може бути зображений у вигляді суми гамільтоніанів невзаємодіючих атомів $\hat{H}_0$ і оператора їх електричної диполь-дипольної взаємодії (1):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_{\text{дип}}^{(\pm)} = \hat{H}_1(\vec{r}_1) + \hat{H}_2(\vec{r}_2) + V_{\text{дип}}^{(\pm)}. \qquad (2)$$

Таким чином, в рамках даного підходу досліджено вплив запізнюючої диполь-дипольної взаємодії атомів на формування і розпад квазістаціонарних колективних (симетричного Ψ_s і антисиметричного Ψ_a) станів квантової системи, що складається з двох нерухомих однакових дворівневих атомів. При обчисленні радіальних матричний елементів диполь-дипольної взаємодії використано хвильові функції модельного потенціалу Фьюса [10]. Отримано замкнуті аналітичні вирази для зсувів і ширин розглянутих колективних станів Ψ_s і Ψ_a з урахуванням запізнюючої диполь-дипольної взаємодії атомів. Проведено теоретичний аналіз зміщення і розщеплення колективних рівнів енергій даної системи, викликаних міжатомною взаємодією. Вивчено асимптотичні розклади дійсних і уявних значень енергії квазістаціонарних беллівських станів Ψ_s і Ψ_a в границі великих і малих міжатомних відстаней.

Проведене нами дослідження механізмів резонансної передачі енергії збудження на довільні відстані від одного дворівневого атома до іншого має важливе практичне значення для фізичної реалізації логічного оператора CNOT [3].

[1] K.A. Valiev, Phys. Usp. 48, 1 (2005).
[2] О.Н. Гадомский, К.К. Алтунин, Quantum Optics, 4061, 0277 (2000).
[3] O.N. Gadomsky, Yu.Yu.Voronov, J. Exp. Theor. Phys. 94, 882 (2002).
[4] A.S. Davydov, Quantum Mechanics, 2nd Ed. (Pergamon Press, Oxford, 1976).
[5] V.Yu. Lazur, S.I. Migalina, A.K. Reitii, Theor. and Math. Phys. 158, 333 (2009).
[6] V.Yu. Lazur, S.I. Myhalyna, O.K. Reity, Phys. Rev. A. 81, 062707 (2010).
[7] V.Yu. Lazur, O.K. Reity, O.F. Pavlyk, J. Phys. A. 43, 175208 (2010).
[8] V.Yu. Lazur, O.F. Pavlyk, O.K. Reity, Theor. and Math. Phys. 165, 1293 (2010)
[9] V.Yu. Lazur, S.I. Myhalyna, O.K. Reity, Int. J. of Mod. Phys. A. 25, 4775 (2010).
[10] V.Yu. Lazur, S.I. Myhalyna, O.K. Reity, V.V. Rubish, M.I. Karbovanets, Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Physics 45, 73 (2019).

ВПЛИВ ВІЗЕРУНКУ ЗАПОВНЕННЯ ВНУТРІШНЬОГО ОБ'ЄМУ ПЛАСТИКОВОГО БРУСКА НА ПОКАЗНИКИ МЕЖІ МІЦНОСТІ

А.Я.Михалко[1], О.О.Гомоннай[2]

[1]Мала Академія Наук, Ужгород
[2]ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород
e-mail: yaroslav.myhalko@uzhnu.edu.ua

Останнім часом адитивні технології все ширше впроваджуються у виробництво, адже вони мають ряд значних переваг перед традиційними способами. Так, 3D-друк активно використовується для отримання деталей військових і пасажирських літаків (F/A-18 Hornet, Airbus A350), корпусів вітрильних яхт і човнів, частин автомобілів (Mercedes-Benz, BMW, Audi AG, Lamborghini, Kingston University, Bentley Motors) та ін. [0]. Згідно класифікації ISO/ASTM 52900:2015 технології 3D-друку поділяють на сім груп залежно від функції та способу отримання кінцевого об'єкту [0]. Існує також широке розмаїття матеріалів для адитивного виробництва [0]. Заповнення внутрішнього об'єму виробу комірцевими структурами дозволяє суттєво зменшити кінцеву вагу однак, це супроводжується зниженням міцності деталі. На сьогоднішній день для вирішення цієї проблеми пропонується потовщувати стінки внутрішніх комірок в місцях дії найбільших навантажень. Наразі, існує мало публікацій присвячених впливу власне геометричної форми комірок на міцність зразків [0, 0, 0].

Метою роботи було вивчення впливу візерунку заповнення внутрішнього об'єму пластикових брусків, отриманих за допомогою 3D принтеру на показники межі міцності.

В програмі Autodesk Inventor 2017 Professional було створено 3D -модель паралелепіпеду розмірами 20x20x100 мм, який було підготовано до друку з використанням слайсерів Slic3r v.1.2.9 та Ultimaker Cura v.4.5. При цьому було отримано моделі з 20% заповненням внутрішнього об'єму наступними візерунками: «лінії», «сітка», «хрестове 3D», «гіроїд», «3D соти» (назви вказані відповідно до назв у слайсерах). За допомогою принтеру GRABER i3 методом пошарового наплавлення було надруковано по 5 брусків кожного типу візерунку, використовуючи філамент акрилонітрил бутадієн стиролу білого кольору діаметром 1,75±0,05 мм (Plexiwire, Україна). Отримані полімерні бруски досліджували на міцність при деформації згину за допомогою гідравлічного пресу ПГПР.

При навантаженні досліджуваних зразків перпендикулярно площині xy (в системі координат, пов'язаній з площиною столу 3D принтеру) та поздовжній осі брусків було встановлено, що у більшості випадків межа міцності (σм) становила близько 20 МПа (20,70±2,24, 18,76±0,65 та 16,82±2,59 МПа для візерунків типу «лінії», «гіроїд» та «хрестове 3D» відповідно). При цьому, досягнення межі міцності відбувалося за відносної деформації 0,025. В той же час, зразки з візерунком заповнення типу «сітка» були на 50% міцніші, порівняно з іншими типами (σм=30,41±2,36 МПа), а межа міцності досягалася при відносній деформації 0,038. Звертає на себе увагу, що показники внутрішнього напруження деталей з візерунком «3D соти» були настільки незначними, що їх не вдалося зафіксувати наявними приладами.

Слід також відмітити, що руйнування досліджуваних зразків відбувалося переважно шляхом деламінації – розшарування по лініях з'єднання суміжних шарів моделі, що вказує на важливий вплив сил міжшарової адгезії матеріалу на кінцеву міцність деталей.

Геометрія візерунку заповнення внутрішнього об'єму має значний вплив на показники міцності кінцевої деталі, що необхідно враховувати при підготовці об'єктів до виробництва з використанням методу пошарового наплавлення матеріалу. Одним з можливих шляхів збільшення міцності є розробка способів підвищення міжшарової адгезії.

[1] С.В. Кондрашов, А.А. Пыхтин, С.А. Ларионов, А.Е. Сорокин Труды ВИАМ. 10, 34 (2019).
[2] А.А. Савченя, А.И. Ермаков Право и экономика (Минск, Республика Беларусь, 2020).
[3] T. Galeta, P. Raos, J. Stojšić, I. Pakši Influence of Structure on Mechanical Properties of 3D Printed Objects. Procedia Engineering. 149, 100 (2016).
[4] International Standard ISO/ASTM 52900 Additive manufacturing – General principles – Terminology 26 (2015).
[5] N. Shahrubudina, T.C. Leea, R. Ramlana An Overview on 3D Printing Technology: Technological, Materials, and Applications. Procedia Manufacturing. 35, 1286 (2019).
[6] Y. Man, X. Luo, Z. Xie, D. Qu Advances in Materials Science and Engineering. 4, 1 (2020).

ПОРІВНЯННЯ ПІДХОДІВ ДО АНАЛІЗУ НАКЛАДЕНИХ ПОДІЙ В ЕКСПЕРИМЕНТІ AMoRE

Н.В.Сокур

Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ
e-mail: sokur@kinr.kiev.ua

Фізика нейтрино сповнена питаннями, які досі залишаються без відповіді: є нейтрино частинкою Дірака чи Майорани, якими є маса та схема масових станів цієї частинки, чи зберігається лептонне число? Одним зі способів отримати відповіді на ці фундаментальні питання є дослідження безнейтринного подвійного бета-розпаду (0ν2β-розпаду), ефекту за рамками Стандартної моделі елементарних частинок. Метою проєкту AMoRE є пошуки 0ν2β-розпаду ядра ^{100}Mo з використанням низькотемпературних сцинтиляційних болометричних детекторів із кристалами молібдатів. Перевага цих детекторів полягає у високій енергетичній роздільній здатності та ефективності реєстрації, можливості розділяти події від бета-частинок (ефект) та альфа-частинок (фон) завдяки одночасній реєстрації сцинтиляційних та теплових сигналів, аналізу форми теплових сигналів. Недоліком низькотемпературних детекторів є повільний відгук, що призводить до випадкових накладень подій, а отже, до збільшення фону в детекторах. Початковий етап експерименту із 1.9 кг сцинтиляційних кристалів молібдату кальцію, виготовленого із кальцію, збідненого на ізотоп ^{48}Ca, та збагаченого ізотопом ^{100}Mo ($^{48збід}Ca^{100}MoO_4$), було завершено 2019 року [1]. Наразі набір даних ведеться в установці AMoRE-I зі сцинтиляторами молібдатів літію та кальцію із загальною масою збагаченого ^{100}Mo близько 3-х кг. Завершальний етап експерименту, AMoRE-II, планується провести із загальною масою сцинтиляційних кристалів близько 200 кг [2], що дозволить виконати пошук 0ν2β-розпаду ^{100}Mo з чутливістю до періоду напіврозпаду на рівні $T_{1/2} \sim 10^{27}$ р (ефективна маса нейтрино Майорани $\langle m_\nu \rangle \sim 0.02 - 0.03$ еВ) і, таким чином, перевірити передбачення інвертованої схеми масових станів нейтрино. Однією з найбільш важливих задач є розробити методи відкидання випадкових накладань подій двонейтринного 2β-розпаду ядра ^{100}Mo. У доповіді буде наведено поточний стан розробок різних підходів до аналізу форми теплових та сцинтиляційних сигналів низькотемпературних сцинтиляційних болометричних детекторів, метою яких є розділення бета- та альфа-подій та відкидання випадкових збігів подій.

[1] V. Alenkov et al., First results from the AMoRE-pilot neutrinoless double beta decay experiment, Eur. Phys. J. C 79 (2019) 791.
[2] V. Alenkov et al., Technical Design Report for the AMoRE 0νββ Decay Search Experiment, arXiv:1512.05957v1 [physics.ins-det].

ДОСЛІДЖЕННЯ ПОДВІЙНОГО БЕТА-РОЗПАДУ ЯДРА ^{106}Cd З ВИКОРИСТАННЯМ КРИСТАЛУ $^{106}CdWO_4$

В.Р. Клавдієнко[1], П.Беллі[2,3], Р. Бернабей[2,3], Ф.А. Даневич[1], А. Інчікітті[4,5], Ф. Капелла[4] , В. Карачіоло[5], Д.В. Касперович[1], В.В. Кобичев[1], А. Леончіні[6], В. Мерло[2,3], О.Г. Поліщук[1], В.І. Третяк[1], Р. Черуллі[2,3]

[1]Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ, Україна
[2]Національний інститут ядерної фізики, відділення у Римі "Тор Вергата", Рим, Італія
[3]Римський університет "Тор Вергата", Рим, Італія
[4]Національний інститут ядерної фізики, відділення у Римі "Ла Сапієнца", Рим, Італія
[5]Національна лабораторія Гран Сассо, Ассерджі, Італія
[6]Римський університет "Ла Сапієнца", Рим, Італія
e-mail: Klavdiienko.volodymyr@gmail.com

Дозволений в рамках Стандартної моделі елементарних частинок та взаємодій (СМ) подвійний бета-розпад із вильотом двох нейтрино ($2\nu2\beta^-$) є найбільш рідкісним ядерним процесом зареєстрованим експериментально у 11-ти ядрах з періодом напіврозпаду 10^{18} - 10^{24} років [1]. Безнейтринна мода розпаду ($0\nu2\beta$) є процесом за межами СМ (оскільки порушує закон збереження лептонного числа) і може вказувати на те, що нейтрино є масивною частинкою Майорани (частинка тотожна своїй античастинці). Майоранівська природа нейтрино може бути одним із факторів баріонної асиметрії Всесвіту. Подвійне двонейтринне електронне поглинання було спостережено у ядрі ^{124}Xe [2], у той же час дозволені двонейтринні процеси електронного поглинання з вильотом позитрона ($2\nu EC\beta^+$) та подвійного позитронного розпаду ($2\nu2\beta^+$) все ще не були зареєстровані. Ядро ^{106}Cd є одним із найбільш перспективних для дослідження таких процесів з огляду на велику енергію розпаду ($Q_{2\beta}$ = 2775.39(10) кеВ).
Для пошуку подвійного бета-розпаду ^{106}Cd було розроблено сцинтиляційний кристал вольфрамату кадмію ($^{106}CdWO_4$) масою 215 г із кадмію збагаченого ізотопом ^{106}Cd до 66% [3]. Вимірювання за допомогою сцинтиляційного детектора із кристалом $^{106}CdWO_4$ ведуться у низькофонових установках розміщених у підземній лабораторії Гран Сассо Національного Інституту ядерної фізики (Італія) [4-6]. В цих експериментах встановлено обмеження на період напіврозпаду ядра ^{106}Cd по різним каналам розпаду на рівні 10^{20} – 10^{22} років. Таким чином, експеримент є одним з найбільш чутливих у дослідженнях $2\nu EC\beta^+$- та $2\nu2\beta^+$-розпадів. Зокрема, чутливість до $2\nu EC\beta^+$ розпаду ядра ^{106}Cd на

основний рівень ядра ^{106}Pd, $T_{1/2} \geq 2.1 \times 10^{21}$ років, досягла рівня теоретичних передбачень ($T_{1/2} \sim 10^{21} - 10^{22}$ років) [7,8]. Обмеження на резонансний $0\nu 2$EC процес на збуджений рівень 2718 кеВ ядра ^{106}Pd встановлено на рівні $T_{1/2} \geq 2.9 \times 10^{21}$ років. Новий етап експерименту із покращеною енергетичною роздільною здатністю та меншим рівнем фону виконується у підземній лабораторії Гран Сассо. Буде представлено попередні результати аналізу даних набраних за 467 діб вимірювань.

[1] A.S. Barabash, Universe 6, 159 (2020).
[2] XENON Collaboration, Nature 568, 532 (2019).
[3] P. Belli, et al., Nucl. Instr. Meth. A 615, 301 (2010).
[4] P. Belli, et al., Phys. Rev. C 85, 044610 (2012).
[5] P. Belli, et al., Phys. Rev. C 93, 045502 (2016).
[6] P. Belli, et al., Universe 6, 182 (2020).
[7] M. Hirsch, et al., Z. Phys. A 347, 151 (1994).
[8] A.S. Barabash, et al., Nucl. Phys. A 604, 115 (1996).

ТОНКА СТРУКТУРА НИЗЬКОЧАСТОТНИХ РАМАН СПЕКТРІВ ХАЛЬКОГЕНІДНИХ СТЕКОЛ В ОБЛАСТІ БОЗОННОГО ПІКУ

Р.М.Голомб, Д.О.Гевці, В.М.Міца
ДВНЗ "Ужгородський національний університет", Ужгород
e-mail:v.mitsa@gmail.com

За останні десятиріччя в фізиці склоподібного стану одним із найбільш дискусійним є питання розуміння природи низькочастотних (НЧ) коливних мод з частотами меншими за 100 см$^{-1}$. Було виявлено, що домінуючими в НЧ області спектру є дві особливості: надлишкове квазіупружне розсіювання (НКПР) нижче 20 см$^{-1}$, що примикає до низькочастотного крила другої особливості - бозонного піку (БП). В даній доповіді розглядається еволюція НКПР в стеклах системи As-S при відхиленні від стехіометричного складу з найбільшою ступінню зв'язності матриці структури – склоподібного с-$As_{40}S_{60}$(с-As_2S_3). На рис.1 приведені різницеві НЧ Раман спектри стекол As-S по відношенню до НЧ Раман спектрів с- As_2S_3, як різниці НЧ Раман спектрів (НЧ As_2S_5-НЧ As_2S_3, НЧ $As_{45}S_{55}$-НЧ As_2S_3).

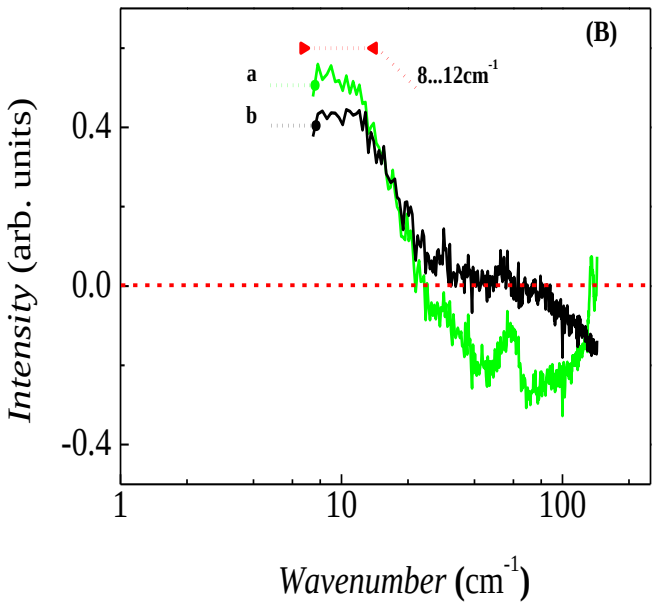


Рис.1. Різницеві НЧ Раман спектри : НЧ As_2S_5-НЧ As_2S_3, НЧ $As_{45}S_{55}$-НЧ As_2S_3

З рис.1 легко бачити, що будь-яке відхилення складу як в бік сірко збагачених стекол, так і в бік збагачених миш'яком стекол веде до зростання інтенсивності в області НЧ Раман спектру, що примикає до низькочастотного крила бозонного піку. Додаткові коливання (рис.1) розміщені в області локалізації НКПР. Природа цих коливань обговорюється в підході м'яких мод (soft mode).

ВПЛИВ ЕНЕРГІЇ ЗБУДЖЕННЯ НА ФОРМУВАННЯ ПОСТ-НЕЙТРОННИХ ВИХОДІВ ПРОДУКТІВ ПОДІЛУ ІЗОТОПІВ ТОРІЮ В ОБЛАСТІ ЕНЕРГІЙ ПЕРШОГО ШАНСУ

Є.В.Олейніков, І.В.Пилипчинець, О.І.Лендєл, О.О.Парлаг

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: zheka.net.ua@gmail.com

Пост-нейтронні виходи продуктів (уламків) – один із основних параметрів, який характеризує процес поділу ядер актинідів. Масові і зарядові розподіли уламків при низько-енергетичному поділі актинідів надають інформацію про вплив ядерної структури та динаміки на процес поділу (динаміка спуску від сідлової точки до точки розриву збудженого ядра) [1]. Особливо важлива ця інформація для ізотопів торію, що знаходиться на межі між до-актинідами та легкими актинідами. Крім того, інформація про виходи продуктів поділу ізотопів торію під дією високоенергетичних фотонів та швидких нейтронів відіграє важливу роль у розробці енергогенеруючих систем нового покоління, а саме, реакторів на швидких нейтронах (^{232}Th–^{233}U паливний цикл) та реакторів з прискорювачами (керовані підкритичні системи) [2,3].

Існуючі оцінені експериментальні данні бібліотеки EXFOR [3] вказують на наявність тонкої структури у масових спектрах асиметричних (легких – A_L = 82 ÷ 105) і важких – A_H = 129 ÷ 155 а.о.м.) продуктів фотонного і нейтронного поділу ізотопів торію (для подільних ядер ^{228}Th*, ^{230}Th*, ^{232}Th* і ^{233}Th*). Збільшені виходи пост-нейтронних важких продуктів та додаткових до них легких продуктів, пов'язані з таким впливом ядерної структури, як ефект близькості до замкнених ядерних оболонок і парно-непарного ефекту ([1] та посилання в ній). Для аналізу експериментальних даних широко використовується модель масових каналів поділу Брози [5], у рамках якої масовий розподіл уламків при поділі актинідів описується суперпозицією 5 гаусіанів, які асоціюються з двома асиметричними подільними каналами (модами) для легких і важких уламків – ”Standard I” (SI), ”Standard II” (SII) і симетричним каналом – ”Superlong” (SL). Для більш точного відтворення структури масових спектрів уламків поділу розробники (або автори) GEF- коду [6], який використовується для моделювання параметрів процесу поділу, розвинули цю модель і розглядають ще два канали – ”Super assymetric” (SA) для легких і важких уламків, при описанні масових спектрів суперпозицією 7 гаусіанами.

Метою представленої роботи є аналіз впливу каналів (SL, SI, SII, SA) поділу на формування масових спектрів продуктів для подільних ядер ^{228}Th*, ^{230}Th*, ^{232}Th* і ^{233}Th* в області енергій першого шансу поділу.

Для реалізації поставленої задачі було:

- проведено комп’ютерне моделювання масових спектрів продуктів поділу для збуджених ядер ^{228}Th*, ^{230}Th*, ^{232}Th* і ^{233}Th*, утворених в результаті реакцій

^{227}Th(n,f), ^{229}Th(n,f), ^{232}Th(γ,f), ^{232}Th(n,f), при взаємодії нейтронів і фотонів з ізотопами торію з застосуванням GEF- коду (версія - GEF 2020/1.1. [7]);
- розрахована область енергій, де переважає перший шанс поділу, тобто в області енергій від порогів (γ,f)- і (n,f)- до порогів (γ,nf)- і (n,nf)-;
- проаналізовано імовірність утворення каналів поділу (SL, SI, SII, SA) для подільних ядер ^{228}Th*, ^{230}Th*, ^{232}Th* і ^{233}Th* (область енергій першого шансу поділу).

В результаті проведених розрахунків отримано наступне:
- встановлені діапазони області енергій першого шансу для подільних ядер:
^{228}Th*: E_n (енергії нейтронів (фотонів), які ініціюють реакцію поділу) = thermal ÷ 6 МеВ, E* (енергії збудження розраховані для вказаних енергій нейтронів) = 7.11 ÷ 12.11 МеВ;
^{230}Th*: E_n = thermal ÷ 6 МеВ, E* = 6.79 ÷ 11.79 МеВ;
^{232}Th*: $E_{photons}$ = 8 ÷ 16 МеВ, E* = 6.44 ÷ 11.44 МеВ;
^{233}Th*: E_n = 1.0 ÷ 6 МеВ, E* = 4.79 ÷ 9.79 МеВ;
- розраховані спектри пост-нейтронних виходів продуктів, які в цілому відображають структуру масових розподілів існуючих експериментальних даних бібліотеки EXFOR [3];
- промодельована імовірність внеску каналів поділу (S_{S1}, S_{S2}, S_{SA}, S_{SL}) у формування кінцевого спектру масових розподілів виходів уламків для вказаних подільних ядер в області енергій першого шансу:
^{228}Th*: S_{S1} = 5.673 ÷ 7.942 %, S_{S2} = 92.17 ÷ 73.96 %, $S_{SA} \leq$ 0.065 %. S_{SL} = 2.155÷ 18.03 %;
^{230}Th*: S_{S1} = 6.38 ÷ 10.4 %; S_{S2} = 93.29 ÷ 83.05 %; $S_{SA} \leq$ 0.121 %; S_{SL} = 0.327 ÷ 6.429 %;
^{232}Th*: S_{S1} = 7.21 ÷ 12.58 %, S_{S2} = 92.62 ÷ 83.23 %, $S_{SA} \leq$ – 0.152 %; S_{SL} = 0.1585 ÷ 4.038 %;
^{233}Th*: S_{S1} = 5.514 ÷ 14.44 %, S_{S2} = 94.41 ÷ 84.69 %, $S_{SA} \leq$ 0.107 %, S_{SL} = 0.0691 ÷ 0.763 %;
- встановлені загальні закономірності для розглянутих ядерних складових систем для області енергій беземісійного поділу: основний внесок у формування масових спектрів (асиметричних) продуктів вносять канали SI і SII, однак треба відмітити що з ростом енергії збудження імовірність утворення каналу SI росте при падінні (зменшені) імовірності утворення каналу SII.

[1] H. Naik et al. European Physical Journal A 56, 82 (2020).
[2] L. Mathieu et al. Nuclear Science and Engineering 161, 78 (2009).
[3] L. Sajo-Bohus et al. AIP Conference Proceedings 1671. 020009 (2015).
[4] Experimental Nuclear Reaction Data (EXFOR). Database Version of 2021-02-20
[5] U. Brosa et al // Phys. Rep. 197, 167 (1990).
[6] K.-H. Schmidt et al. Nuclear Data Sheets. 131, 107 (2016).
[7] GEF 2020/1.1. http://www.khschmidts-nuclear-web.eu/GEF-2020-1-1.html

РОЗРАХУНКИ ПЕРЕРІЗІВ ЗБУДЖЕННЯ $3p^6$ ТА $3s^2$ ОБОЛОНОК АТОМА КАЛІЮ

В.І.Роман

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: viktoriyaroman11@gmail.com

Важливість дослідження процесу збудження субвалентної оболонки (автоіонізації) у атомах важких лужних металів було аргументовано раніше у циклі експериментальних робіт (див. [1] та посилання в ній), проте теоретичні дослідження цих атомів є дуже нечисельними. Нещодавно нами було проведено теоретичне дослідження процесів збудження та іонізації окремих електронних оболонок атома Rb [1]. Тут ми представляємо перші результати розрахунків перерізів збудження $3p^6$ та $3s^2$ оболонок атома K (див. рис.1).

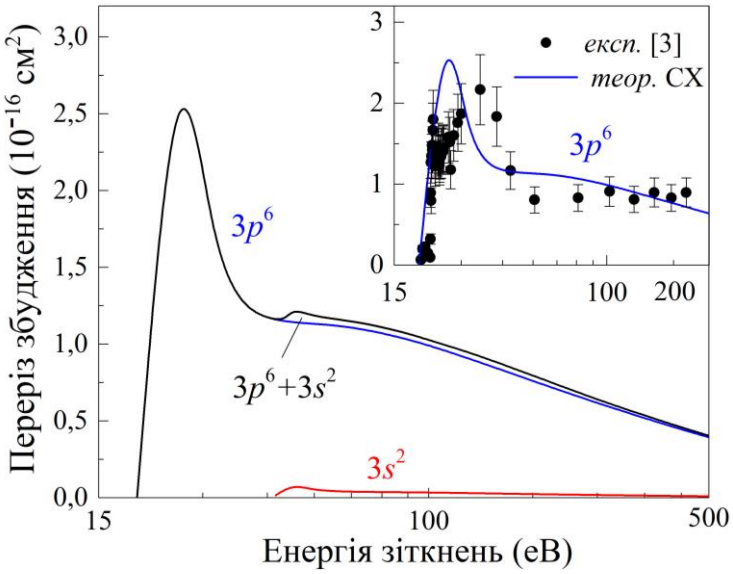


Рис.1. Перерізи збудження $3p^6$ і $3s^2$ оболонок атома K. На вставці показано порівняння з експериментальними даними [3] перерізу збудження $3p^6$ оболонки.

Розрахунки проведено у наближенні релятивістських спотворених хвиль у рамках програмного пакета Flexible Atomic Code [2]. Переріз збудження $3p^6$ оболонки отримано як суму перерізів збудження 96 автоіонізаційних станів конфігурацій $3p^5\,4s^2$, $3p^5\,3d4s$, $3p^5\,4s4p$, $3p^5\,4s5s$, $3p^5\,3d5s$, $3p^5\,4d4s$. Аналогічно, переріз збудження $3s^2$ оболонки є сумою 38 розрахованих перерізів збудження автоіонізаційних станів конфігурацій $3s\,4s^2$, $3s\,4s4p$, $3s\,4s4d$, $3s\,4s5s$, $3s\,4s3d$, $3s\,5s5p$, $3s\,4s6s$. Порівняння з експериментальними даними перерізу збудження $3p^6$ оболонки [3] (див. вставку на рис.1) показує задовільне узгодження з нашими розрахунками. Наше дослідження показало, що збудження $3s^2$ оболонки дає вклад 7% у переріз автоіонізації та ≈1,5% у повний переріз іонізації атома K. Водночас показано, що збудження $3p^6$ оболонки є основним процесом автоіонізації атома K і дає вклад 29% у його повний переріз однократної іонізації.

[1] V. Roman et al., J. Phys. B. 48, 205204 (2015).
[2] M. Gu, Canad. J. Phys. 86, 675 (2008).
[3] А. Боровик, ЖТФ 82, 18 (2012).

АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК
AUTHOR INDEX

Avaldi L. ***113***
Bence N. ***62***
Bernes E. ***113***
Bharti S. ***32***
Bíla J. ***107***
Bolognesi P. ***113***
Bondar B.M. ***64***
Callegari C. ***113***
Carlotto S. ***76***
Casarin M. ***76***
Castrovilli M.C. ***113***
Catone D. ***113***
Chvatil D. ***43, 107***
Ciavardini A. ***113***
Cinchetti M. ***76***
Cojocariu I. ***76***
Coreno M. ***113***
Cossaro A. ***76***
Demes S. ***80***
Devetta M. ***113***
Faccialà D. ***113***
Feyer V. ***76***
Floreano L. ***76***
Fraia M.Di ***113***
Fronzoni G. ***113***
Glukhov K. ***38***
Grabar A. ***38***
Granja C. ***107***
Hasynets S. ***38***
Havránek V. ***107***
Jonauskas V. ***21***
Jugovac M. ***76***
Kadenko I.M. ***64***
Kapustianyk V. ***119***
Karachevtseva A.V. ***121***
Kmetyuk Ya.V. ***64***
Kohutych A. ***38***
Konstantinov V.A. ***121***
Krivchikov A.I. ***121***
Kučas S. ***21***
Kuda T. ***43***
Kynienė A. ***21***
Leshchenko B.Yu. ***64***
Lique F. ***80***
Macková A. ***107***
Masys Š. ***21***
Molnar A. ***38***
Molnar A.Sh. ***100***
Mykhailyk V. ***119***
Oancea C. ***107***
Olsansky V. ***43***
Ovcharenko Y. ***109***
Piamonteze C. ***76***
Plekan O. ***113***
Ponzi A. ***113***
Prince K.C. ***113***
Puschnig P. ***76***
Richter R. ***113***
Rudko M. ***119***
Sa'adeh H. ***113***
Sagan V.V. ***121***
Schneider C.M. ***76***
Sharma L. ***86***
Shpenik O.O. ***100***
Sturmeit H.M. ***76***
Toffoli D. ***113***
Tsyhyka M. ***38***
Vallerand C. ***54***
Verdini A. ***76***
Vozzi C. ***113***
Vysochanskii Yu. ***38***
Yermakov O. ***152***
Zamborlini G. ***76***
Zhilyaev B.E. ***26***
Алексій В.В. ***60***
Баженов В.Ю. ***105***
Бандурін Ю.А. ***68***
Бацевич О.Б. ***89***
Безшийко О.А. ***89***
Беллі П. ***168***
Березницька Н.Ю. ***150***
Берест В.І. ***54***
Бернабей Р. ***168***
Біган З.М. ***158***
Бовгира О. ***82, 85***
Бойко Н.В. ***123, 132***
Брандіс Й.Й. ***66***
Бричевський М.М. ***56***
Булгакова А.І. ***68, 70, 138***
Васильєв О.В. ***136, 138, 140, 142***
Васильківський Є.В. ***144***
Васьків А. ***74***
Ватрала М.І. ***146, 148***
Вийконь І.І. ***154***
Водін О.М. ***54, 111***
Гайсак А. ***156***
Гайсак І.І. ***94, 129***
Гал Д. ***156***
Гарапко Є.А. ***94***
Гат'ян М.А. ***78***
Гевці Д.О. ***170***
Гедеон С.В. ***150***
Гедеон В.Ф. ***150***
Голінка-Безшийко Л.О. ***54, 89, 111***
Голомб Р.М. ***170***
Голомб Р.Р. ***129***
Гомонай О. ***102***
Гомоннай О.О. ***165***
Гончаров О.А. ***105***
Горват А.А. ***96***
Грабар О.О. ***123***
Грицак Р.В. ***146, 148***
Даневич Ф.А. ***168***
Демеш Ш.Ш. ***136, 138, 140, 142***
Деречкей П.С. ***158***
Дзіковський В. ***85***
Добровольський А.М.***105***
Дубау М. ***58***
Ердевді М.М. ***68***
Євич В.Р. ***116***
Євич М.Я. ***116***
Єгіазарян О.В. ***150***
Заяць Т.М. ***78***

Іванов В. ***158***
Ільчук Г. ***85***
Інчікітті А. ***168***
Каденко І.М. ***54, 111***
Капелла Ф. ***168***
Капустяник В. ***72, 74***
Карачіоло В. ***168***
Карбованець М.І. ***116***
Касперович Д.В. ***168***
Катовскі К. ***129***
Кашуба А. ***85***
Клавдієнко В.Р. ***168***
Клюєв Е. ***159***
Кобичев В.В. ***168***
Коваленко М. ***82, 85***
Коваленко Л.Л. ***56***
Козаченко О. ***82***
Колесніченко А.-М.С. ***66***
Коноваленко О.О. ***144***
Кочемба А.А. ***83***
Красилинець В.М. ***102, 125***
Краснiков В.В. ***49***
Круцан А.М. ***66***
Крячок К.О. ***54, 111***
Кудін О.О. ***148***
Кузьма В.В. ***66***
Кузьма С.М. ***163***
Кушнір В.А. ***54, 111***
Лазоренко Я.П. ***87, 98***
Лазур В.Ю. ***60, 83, 150,163***
Лебедь В.С. ***89***
Лендєл О.І. ***117***
Леончіні А. ***168***
Лисаченко Я.І. ***92***
Лисуненко Н.О. ***56***
Лопушанська Б.В. ***91***
Мазур В.М. ***158***
Малініна А.О. ***146, 148***
Маргітич Б.М. ***122***
Мартинов Є.С. ***131***
Мартишичкін В.О. ***94***
Маслюк В.Т. ***123, 125, 132***
Мегела І.Г. ***115***
Мерло В. ***168***
Мигалина С.І. ***60***
Мисько-Крутік Н.С. ***103***
Мисюра А.Г. ***87***
Митропольський І.Є. ***66***
Михалко А.Я. ***165***
Мінькович В.В. ***96***
Мітроченко В.В. ***54, 111***
Міца В.М. ***170***
Міца О.В. ***49***
Міцай В.П. ***87, 98***
Молнар К.Б. ***161***
Молнар О. ***156***
Молнар Ш.Б. ***122***
Мошкола І. ***102***
Найко І.В. ***105***
Олейніков Є.В. ***117, 127***
Олійник С.М. ***54, 111***
Островерх А.С. ***56, 58***
Островерх Є.М. ***56***, 58
Палінічак П.В. ***111***
Парлаг О.О. ***117***
Пережогін С.А. ***54***
Петрусь Р. ***85***
Пилипченець І.В. ***117, 127***
Пітченко Г.Ф. ***125***
Поліщук О.Г. ***168***
Поп М.В. ***116***
Поп О.М. ***115, 123, 127***
Рейтій О.К. ***163***
Ремета Є.Ю. ***136, 138, 140, 142***
Роман В.І. ***127, 171***
Рубіш В.В. ***163***
Рубіш В.М. ***49***
Рудко М. ***74***
Самелюк А.В. ***56***
Сватюк Н.І. ***123, 125, 127***
Світличний Є. ***102***
Семак С. ***72, 74***
Семків І. ***85***
Симканич О.І. ***123, 125, 127***
Симулик В.М. ***78, 154***
Сокур Н.В. ***167***
Солнишкін А.А. ***94***
Солодовнік А.О. ***103***
Соломон А.М. ***125***
Степаненков Є. ***159***
Степкін С.В. ***144***
Суховія М.І. ***66***
Танчак А.М. ***129***
Тарнай О.А. ***123***
Терсімонов Г.С. ***131***
Тимощук С.А. ***132***
Третяк В.І. ***168***
Турховський О.М. ***123***
Усатова О.О. ***134***
Хушвактов Ж. ***94***
Черуллі Р. ***168***
Чорній Ю. ***72, 74***
Шафраньош І.І. ***66, 122***
Шафраньош М.І. ***66, 122***
Шпеник В.Ю. ***122***
Шпеник О.О. ***122***
Шуаібов О.К. ***146, 148***

Науково-інформаційне видання

ІЕФ-2021

Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів

Ужгород, 26–28 травня 2021 року

МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

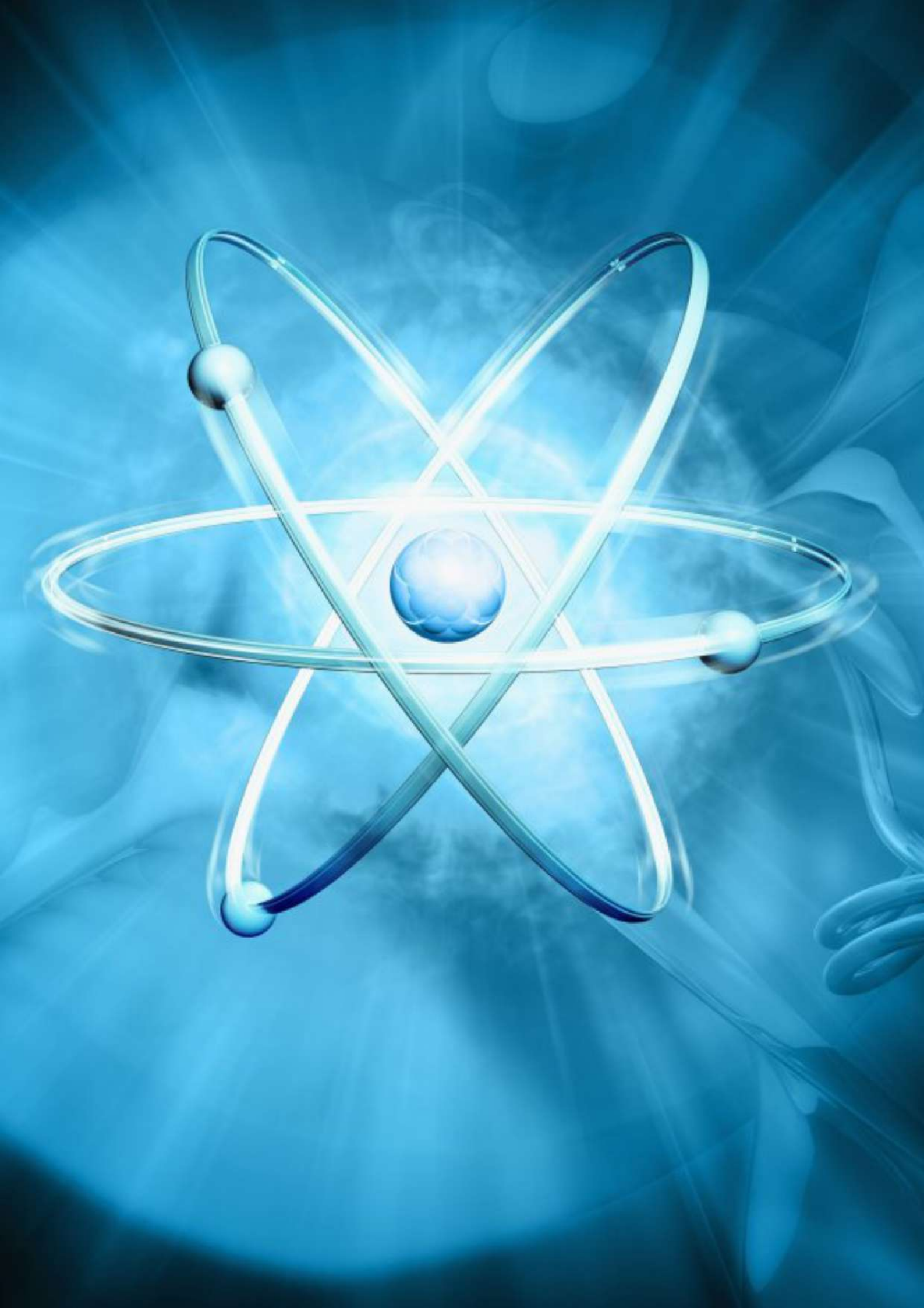
Укладач: ***В.І. Роман***, *к. ф.-м.н.*

Відповідальні за випуск:
А.М. Завілопуло, *д. ф.-м.н, проф.*
Ю.М. Ажнюк, *д. ф.-м.н.*
.

Тези доповідей подано в авторський редакції

Оригінал-макет: ***В.І. Роман***, *к. ф.-м.н.*
Обкладинка: ***В.І. Роман***, *к. ф.-м.н.*

Інститут електронної фізики НАН України
88017 м. Ужгород, вул. Університетська, 21
тел./факс: (0312) 64-36-50

Здано до складання 10.04.2021. Підписано до друку 17.05.2021.
Формат 60x84/16. Гарнітура Times New Roman. Друк офс.
Ум. друк. арк 10,23 Обл.-вид. арк. 8,68. з оригінал-макетів замовника
Наклад 200 примірників
Замовлення № 18

Видавництво «ФОП Сабов А.М.»
м. Ужгород, вул. Університетська, 21/220
Тел./факс: (0312) 64-37-22
Свідоцтво суб’єкта видавничої справи ДК № 4855 від 25.02.2015 р.
Друк: ФОП Сабов А.М., тел. 099-315-00-93