

Ужгород, 15-18 травня 2023 р.

**Міжнародна конференція
молодих учених та аспірантів**

МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ



BOOK OF ABSTRACTS

**International Conference
of Young Scientists
and Post-Graduate Students**

Uzhhorod, 15–18 May 2023

Інститут електронної фізики
Національної академії наук України



ІЕФ-2023



Міжнародна конференція
молодих учених
та аспірантів

Ужгород, 15–18 травня 2023

МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

BOOK OF ABSTRACTS

International Conference
of Young Scientists
and Post-Graduate Students

Uzhhorod, May 15–18, 2023

ІЕФ-2023

Ужгород 2023

УДК 539.1
М 34

Збірник містить анотації до доповідей, представлених на Міжнародній конференції молодих учених та аспірантів ІЕФ-2023. Доповіді присвячені дослідженню явищ при електронних і атомних зіткненнях; елементарних процесів у лазерах і низькотемпературній плазмі; спектроскопії атомів, молекул, кристалів і неупорядкованих 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-2023. 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

Т.Ю. Попик, кандидат фізико-математичних наук

© ІЕФ НАН України, 2023

© В.І. Роман, укладач, оригінал-макет, 2023

ISBN 978-617-8127-16-9

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА	<u>10</u>
ВИКОРИСТАННЯ РАМАНІВСЬКОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАНОКРИСТАЛІВ Ю. М. Ажнюк <i>Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна</i>	<u>17</u>
EXPERIMENT MEETS THEORY IN REACTIVE ION-MOLECULE COLLISION STUDIES FROM AN ASTROPHYSICAL PERSPECTIVE S. Demes, S. Carles, A. Mortada, R.A. Jara-Toro, B. Joalland, A. Benidar, F. Lique & L. Biennier <i>Univ Rennes, IPR (Institut de Physique de Rennes), UMR 6251, Rennes, France</i>	<u>19</u>
КОМП'ЮТЕРНА СИМУЛЯЦІЯ ПОГЛИНАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК В₄С ДО КОМПОНЕНТ СПЕКТРУ ГАЛЬМІВНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ МІКРОТРОНА М-30 Є.В. Олейніков, І.В. Пилипчинець, О.О. Парлаг <i>Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород</i>	<u>21</u>
HIGH-TRANSPARENCY AND RESILIENCE 3D MICRO-OPTICS OF HYBRID-POLYMER SZ2080™: MADE VIA ULTRAFast LASER NANOLITHOGRAPHY, CALCINATION AND ATOMIC LAYER DEPOSITION K. Galvanauskas, D. Astrauskytė, R. Žvirblis, G. Balčas, D. Gailevičius, L. Grinevičiūtė, M. Malinauskas <i>Laser Research Center, Physics Faculty Vilnius University, Vilnius, Lithuania; Optical Coatings Laboratory, Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania</i>	<u>23</u>
ІСТИННИЙ МІООНІЙ ТА КІНЕМАТИЧНА СИМЕТРІЯ В ЗАДАЧІ ТРЬОХ ТІЛ А.І. Гайсак ¹ , М.І. Гайсак ² ¹ Ужгородський національний університет, Ужгород ² Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород	<u>24</u>
СПЕКТРАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ МОЛЕКУЛИ ГЛЮТАМІНУ І. Мошкола ¹ , М. Свириба ¹ , О. Молнар ² , О. Шпеник ² , О. Гомонай ¹ ¹ Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород ² ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород	<u>26</u>

ГІБРИДНІ НАНОСТРУКТУРИ $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Au}$ ТА $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Ag}$ ДЛЯ РЕАЛІЗАЦІЇ ЕФЕКТІВ ПОВЕРХНЕВО ПІДСИЛЕНОЇ КОЛИВАЛЬНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ <u>М. Раллєв¹, О. Фесенко¹, А. Яремкевич¹, О. Лавриненко²</u> ¹ SES лабораторія, Інститут фізики НАН України, Київ. ² Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ..	<u>28</u>
ОСОБЛИВОСТІ РАДІОНУКЛІДНОГО СКЛАДУ НАМУЛІВ ГІРСЬКИХ ВИТОКІВ р. ТИСА (ЗАКАРПАТТЯ, УКРАЇНСЬКИЙ МАСИВ) <u>Н.І. Сватюк¹, В.Т. Маслюк¹, О.І. Симканич², О.А. Тарнай¹, М.П. Візенко¹</u> ¹ Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород	<u>30</u>
ДОСЛІДЖЕННЯ ЦЕНТРІВ ЗАБАРВЛЕННЯ У ДОЗИМЕТРАХ ДТГ (LiF: Mg, Ti), ОПРОМІНЕНИХ ЕЛЕКТРОНАМИ З ЕНЕРГІЄЮ 18 MeV <u>О.М. Поп, І.Г. Мегела, Й.Й. Гайніш, М.П. Візенко</u> Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород	<u>32</u>
МЕТОДИКА ТЕРМОІОННОГО НАНЕСЕННЯ ПОКРИТТІВ З ПОПЕРЕДНІМ БОМБАРДУВАННЯМ ПОВЕРХНІ ПІДКЛАДКИ ПОТОКОМ НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНИХ ІОНІВ <u>Я.О. Гречко, І.М. Середа, Є.В. Бабенко, М.О. Азаренков</u> Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків	<u>33</u>
ВЗАЄМОДІЯ ЕЛЕКТРОНІВ НИЗЬКИХ ЕНЕРГІЙ З МОЛЕКУЛАМИ ЛЕЙЦИНУ ТА ІЗОЛЕЙЦИНУ <u>Б.П. Баленко, Л.Г. Романова, О.В. Папп, В.С. Вукстич</u> Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород	<u>35</u>
ВЕЛИКОМАСШТАБНІ СТРУКТУРИ ВСЕСВІТУ: СПОСТЕРЕЖНІ ДАНІ, МАТЕМАТИЧНІ ТА ІТ-МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ І.Б. Вавилова Головна астрономічна обсерваторія НАН України, Київ, Україна	<u>36</u>
АЛЬТЕРНАТИВНА МІКРОЕНЕРГЕТИКА <u>О. Молнар</u> ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород	<u>38</u>
ОКСИДНО-КЕРАМІЧНІ ПОКРИТТЯ НА ТИТАНІ І ЙОГО СПЛАВАХ БІОМЕДИЧНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ О. Калініченко ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна	<u>40</u>

ВПЛИВ ЕНЕРГІЇ ЗБУДЖЕННЯ НА ФОРМУВАННЯ ФРАГМЕНТІВ ФОТОПОДІЛУ ^{238}U ДЛЯ ПЕРШОГО ШАНСУ <u>Є.В. Олейніков</u>, І.В. Пилипчинець, О.О. Парлаг <i>Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород</i>	<u>42</u>
FEW-PHOTON WAVE PACKET PROPAGATION VIA A COMPOSITE QUANTUM EMITTER IN A ONE-DIMENSIONAL WAVEGUIDE <u>V. L. Andriichuk</u>¹, E. V. Stolyarov² ¹<i>Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine</i> ²<i>Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine</i>	<u>44</u>
ЧАС ПЕРЕДАЧІ КВАНТОВОЇ ІНФОРМАЦІЇ ВІД ОДНОГО АТОМА-КУБІТА ДО ІНШОГО З УРАХУВАННЯМ ЗАТУХАННЯ КВАНТОВИХ СТАНІВ <u>С.М. Кузьма</u>, В.Ю. Лазур, В.В. Рубіш, О.К. Рейтій <i>ДВНЗ "Ужгородський національний університет", Ужгород</i>	<u>45</u>
ФОТОВОЛЬТАЇЧНА КОМІРКА НА ОСНОВІ n-ZnO МІКРОСТРИЖНІВ ТА p-GaN ПЛІВКИ <u>В. Васільєв</u>¹, Б. Турко¹, Б. Садовий^{1,2}, Ю. Еліяшевський¹, Р. Серкіз¹ ¹<i>Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів</i> ²<i>Інститут фізики високих тисків ПАН, Варшава</i>	<u>47</u>
ANOMALOUS LOW THERMAL CONDUCTIVITY OF ATOMICALLY THIN InSe PROBED BY SCANNING THERMAL MICROSCOPY <u>Z.R. Kudrynskyi</u>,^{1,2,*} D. Buckley,³ N. Balakrishnan,^{4,5} T. Vincent, ³ D. Mazumder,¹ E. Castanon,⁶ Z.D. Kovalyuk,² O. Kolosov,⁶ O. Kazakova,³ A. Tzalenchuk,³ and A. Patané¹ ¹ <i>School of Physics and Astronomy, University of Nottingham, Nottingham, UK</i> ² <i>Institute for Problems of Materials Science, NAS of Ukraine, Chernivtsi Branch, Chernivtsi, Ukraine</i> ³ <i>National Physical Laboratory, Teddington, UK</i> ⁴ <i>National Graphene Institute, The University of Manchester, Manchester, UK</i> ⁵ <i>School of Chemical and Physical Sciences, Keele University, Keele, UK</i> ⁶ <i>Department of Physics, Lancaster University, Lancaster, UK</i>	<u>49</u>
КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВИХОДІВ ПРОДУКТІВ ^{89}Rb і ^{138}Cs, УТВОРЕНИХ ПРИ АКТИВАЦІЇ ЯДЕРНИХ МАТЕРІАЛІВ НЕЙТРОНАМИ, ДЛЯ ІЗОТОПНОЇ ІДЕНТИФІКАЦІЇ <u>І.В. Пилипчинець</u>, О.О. Парлаг, Є.В. Олейніков <i>Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород</i>	<u>51</u>

ELECTRICAL PROPERTIES OF HETEROSTRUCTURES n-InSe/n-Mn₂O₃ I.G. Tkachuk <i>Institute for Problems of Materials Science, Chernivtsi Branch,</i> <i>Chernivtsi, Ukraine</i>	<u>53</u>
СТРУКТУРА ДИФРАКЦІЙНОГО КОНУСА ПРУЖНОГО ПРОТОН-ПРОТОННОГО РОЗСІЯННЯ ПРИ ВИСОКИХ ЕНЕРГІЯХ У МОДЕЛІ МАКСИМАЛЬНОГО ПОМЕРОНА Й ОДДЕРОНА Н. Бенце ¹ , І. Сані ² , О. Лендел ³ ¹ <i>Ужгородський Національний Університет, Ужгород, Україна</i> ² <i>Університет ім. Роланда Етвеша, м. Будапешт, Угорщина</i> ³ <i>Інститут електронної Фізики НАН України, Ужгород, Україна</i>	<u>55</u>
ВЛАСТИВОСТІ ГІПЕРЯДРА ⁴H У ТРИКЛАСТЕРНИХ МІКРОСКОПІЧНИХ МОДЕЛЯХ М.Д. Солоха-Климчак, О.В. Нестеров <i>Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ</i>	<u>56</u>
РОЛЬ СТОХАСТИЧНИХ ФАКТОРІВ У КІНЕТИЦІ ТЕРМОВИСВІЧУВАННЯ ЛЮМІНОФОРІВ: МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО П.В. Яворський ¹ , П.С. Деречкей ¹ , О.М. Поп ¹ , В.Т. Маслюк ¹ , С.Ф. Гончарова ² , Ф.Ф. Полої ² ¹ <i>Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород</i> ² <i>ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород</i>	<u>58</u>
РОЗРАХУНКИ СТРУКТУРИ АТОМА ТИТАНУ З ВІДКРИТИМИ d-ОБОЛОНКАМИ М.В. Товт, В.Ю. Лазур, Є.А. Нодь <i>ДВНЗ «Ужгородський національний університет»</i>	<u>60</u>
ПОВНИЙ ПЕРЕРІЗ ОДНОКРАТНОЇ ІОНІЗАЦІЇ АТОМА КАЛІЮ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРМ В.І. Роман <i>Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород</i>	<u>61</u>
ПЕРЕРІЗ ФОТОНЕЙТРОННОЇ РЕАКЦІЇ НА ЛЕГКОМУ ІЗОТОПІ ТЕЛУР-120 П.С. Деречкей, З.М. Біган, О.М. Поп <i>Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна</i>	<u>63</u>
SPECTRAL STUDIES OF SOLID SOLUTIONS OF THE Ag₇SiS₅I–Ag₇GeS₅I SYSTEM WITH ARGYRODITE STRUCTURE І.О. Shender, A.I. Pogodin, M.Y. Philep, T.O. Malakhovska, O.P. Kokhan, L.M. Suslikov <i>Uzhhorod National University, Uzhhorod, Ukraine</i>	<u>65</u>

TOWARDS UNDERSTANDING THE ELECTRONIC STRUCTURE OF GASEOUS QUINOLINES BY SYNCHROTRON RADIATION <u>O. Plekan</u> ¹ , C. Grazioli ² , M. Coreno ³ , M. Di Fraia ¹ , K. C. Prince ¹ , R. Richter ¹ and A. Ponzi ⁴ ¹ <i>Elettra-Sincrotrone Trieste S.C.p.A., in Area Science Park, 34149 Basovizza, Trieste, Italy,</i> ² <i>IOM-CNR, Istituto Officina dei Materiali, Basovizza SS-14, Km 163.5, 34149 Trieste, Italy</i> ³ <i>CNR-Istituto di Struttura Della Materia (CNR-ISM), in Area Science Park, 34149 Basovizza, Trieste, Italy,</i> ⁴ <i>Ruder Bošković Institute, Bijenička cesta 54, 10000, Zagreb, Croatia.</i>	<u>66</u>
SPIKE-LIKE TRANSIENT CURRENT IN A SINGLE-MOLECULAR FIELD-EFFECT TRANSISTOR <u>V. O. Leonov</u> , Ye. V. Shevchenko, E. G. Petrov Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of NAS of Ukraine, Kyiv	<u>68</u>
МОДЕЛЮВАННЯ ВАРІАЦІЙ ПАРАМЕТРІВ ДИНАМІЧНИХ ТА ТЕПЛОВИХ ПРОЦЕСІВ У ГЕОКОСМОСІ НАД УКРАЇНОЮ У ПЕРІОД МАКСИМУМУ 24-ГО ЦИКЛУ СОНЯЧНОЇ АКТИВНОСТІ <u>В.В. Колодязний</u> ^{1,2} , М.В. Ляшенко ¹ , Л.Я. Ємельянов ¹ , Д.А. Дзюбанов ² ¹ <i>Інститут іоносфери НАН і МОН України, Харків</i> ² <i>Національний технічний університет, Харків</i> «Харківський політехнічний інститут», Харків	<u>70</u>
ОСОБЛИВОСТІ АГРЕГАЦІЇ ЦΙΑНІНОВИХ БАРВНИКІВ У МАТРИЦЯХ TiO₂ <u>П.В. Пісклова</u> , І.Ю. Ропаківа, І.І. Беспалова, С.Л. Єфімова, О.В. Сорокін Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України, Харків	<u>71</u>
EXTREMELY NARROW, SHARP-PEAKED RESONANCES AT THE EDGE OF THE CONTINUUM <u>I. Lukosiunas</u> ¹ , L. Grineviciute ² , J. Nikitina ² , D. Gailevicius ¹ , and K. Staliunas ^{1,3,4} ¹ <i>Vilnius University, Faculty of Physics, Laser Research Center, Vilnius, Lithuania</i> ² <i>Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania</i> ³ <i>ICREA, Passeig Lluís Companys 23, 08010, Barcelona, Spain</i> ⁴ <i>UPC, Dep. de Fisica, Terrassa (Barcelona) Spain</i>	<u>72</u>
ФОТОЛЮМІНЕСЦЕНЦІЯ ВОДНОГО РОЗЧИНУ МОЛЕКУЛ ТИМІНУ <u>М.М. Сароз</u> , М.І. Шафраньош, М.О. Маргітич, М.І. Суховія, Ш.Б. Молнар, А.І. Лемко, О.О. Шпеник, І.І. Шафраньош ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород	<u>74</u>

SCALING INDEX TO MEASURE SPATIAL PATTERNS IN COMPETING DYNAMICS ISING MODEL <u>J. Kvedaravicius¹, A. Kononovicius²</u> ¹ <i>Faculty of Physics, Vilnius University, Lithuania</i> ² <i>Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Lithuania</i>	<u>76</u>
МАНІПУЛЮВАННЯ ПОКАЗНИКОМ ЗАЛОМЛЕННЯ ТОНКИХ ПЛІВОК ТРИ-(8-ГІДРОКСИХІНОЛІН) АЛЮМІНІЮ, ДИЦІАНОМЕТИЛЕНПІРАНУ ТА ЙОГО ПОХІДНИХ <u>В. Васільєв¹, Б. Турко¹, І. Карбовник¹, А. Коструба², О. Кушнір¹</u> ¹ <i>Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів</i> ² <i>Львівський національний університет ветеринарної медицини та біотехнологій імені Степана Гжицького, Львів</i>	<u>79</u>
INVESTIGATION OF ASPIRIN, PARACETAMOL AND IBUPROFEN BY PHOTOEMISSION SPECTROSCOPY AND THEORETICAL CALCULATIONS <u>H. Sa'adeh^{1,2}, K.C. Prince^{2,3}, R. Richter², V. Vasilyev⁴, D.P. Chong⁵, F. Wang³</u> ¹ <i>Department of Physics, The University of Jordan, Amman 11942, Jordan</i> ² <i>Elettra Sincrotrone Trieste, Area Science Park, Basovizza, Trieste, Italy</i> ³ <i>Department of Chemistry and Biotechnology, School of Science, Computing and Engineering Technologies, Swinburne University of Technology, Melbourne, Victoria 3122, Australia</i> ⁴ <i>National Computational Infrastructure, Australian National University, Canberra, ACT 0200, Australia</i> ⁵ <i>Department of Chemistry, University of British Columbia, Canada</i>	<u>80</u>
PHASE DIAGRAMS OF HOMOCYCLIC HYDROCARBONS <u>V.V. Sagan, V.A. Konstantinov, A.V. Karachevtseva</u> <i>B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, Ukraine</i>	<u>82</u>
РОЗРАХУНКИ СТРУКТУРИ АТОМА V ТА ІОНА V⁺ <u>А.А. Кочемба, В.Ю. Лазур, С.В. Гедеон</u> <i>ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород</i>	<u>84</u>
АПАРАТНІ МОЖЛИВОСТІ ОБЛАДНАННЯ ФІРМИ «Mirion (Canberra) Technologies, Inc.» ДЛЯ РАДІАЦІЙНОГО МОНІТОРИНГУ ОБ'ЄКТІВ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА <u>С.В. Самочерних</u> <i>Товариство з обмеженою відповідальністю «Канберра Паккард», Київ</i>	<u>86</u>

ІОНІЗАЦІЯ МОЛЕКУЛ ГЛУТАМІНУ ТА ГЛУТАМІНОВОЇ КИСЛОТИ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРІМ О.В. Васильєв ¹ , Ш.Ш. Демеш ² , А.І. Булгакова ¹ ¹ Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород ² Institute for Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen, Hungary	<u>88</u>
DISCOVERY OF POLARIZATION DEGREE OF FREEDOM FOR LOCALIZED LIGHT О. Yermakov ¹ , S. Polevoy ² ¹ V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine ² O. Ya. Usikov Institute for Radiophysics and Electronics NAS of Ukraine, Kharkiv, Ukraine	<u>90</u>
ANTI-/ PROOXIDANT AND ROS-SENSING PROPERTIES OF RE³⁺-DOPED COLLOIDAL CERIA NANOCRYSTALS DETECTED BY SPECTROSCOPIC TECHNIQUES V. Seminko, P. Maksimchuk, V. Klochkov, S. Yefimova Institute for Scintillation Materials, National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkiv, Ukraine.	<u>92</u>
ЗМІЩЕННЯ КУТА БРЮСТЕРА ЗА ДОПОМОГОЮ ДВОВИМІРНИХ МАТЕРІАЛІВ ТА СТРУКТУР О. Маньковська ¹ , О. Є. Єрмаков ² ¹ Білицький ліцей № 1, смт Білики, Полтавська область, Україна ² Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків, Україна	<u>93</u>
ХАРАКТЕРИСТИКИ ГАЗОРОЗРЯДНОЇ УЛЬТРАФІОЛЕТОВОЇ ЛАМПИ НА ПАРОГАЗОВІЙ СУМІШІ «Ne – Ag₂S» М.І. Ватрала, Р.В. Грицак, К.А. Семенюк, О.К. Шуаїбов ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород, Україна	<u>95</u>
ДОСЛІДЖЕННЯ РАДІАЦІЙНОЇ СТІЙКОСТІ АДСОРБЕНТІВ З ВИКОРИСТАННЯМ ДЖЕРЕЛА СІРІУС О. Сич, В. Лазур, Г. Васильєва, О. Окунєв, К. Стратійчук, А. Запорожець ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород, Україна	<u>97</u>
DESIGNING HYPERBOLIC METASURFACE А. Hrinchenko, О. Yermakov V. N. Karazin National University, Kharkiv, Ukraine	<u>99</u>

PECULIARITIES OF PHASE DIAGRAMS OF HYDROCARBONS WITH HETEROATOM <u>A.V. Karachevtseva</u> , V.A. Konstantinov, V.V. Sagan <i>B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of NAS of Ukraine, Kharkiv, Ukraine</i>	<u>100</u>
PULSATING BROWNIAN MOTOR WITH DOUBLE-SINE POTENTIAL: SPECIFICS OF PARAMETERIZATION <u>A.D. Terets</u> ^{1,2} , T.Ye. Korochkova ² ¹ <i>Faculty of Physics, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Ukraine.</i> ² <i>Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine.</i>	<u>101</u>
ДОСЛІДЖЕННЯ СПЕКТРІВ ЕЛЕКТРОН-ФОТОННОЇ ЕМІСІЇ ПОВЕРХОНЬ МОНОКРИСТАЛУ ХЛОРИДУ НАТРІЮ МОДИФІКОВАНИХ НАПИЛЕННЯМ НАНОПЛІВОК ОКСИДІВ МІДІ І ЦИНКУ <u>Й.Й. Брандіс</u> , А.А. Сливка, А.А. Минка, О.М. Конопльов <i>ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород, Україна</i>	<u>103</u>
КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТОПОЛОГІЧНОЇ ЗВ'ЯЗНОСТІ БІООРГАНІЧНИХ СПОЛУК В РАДІАЦІЙНИХ ЕКСПЕРИМЕНТАХ <u>В.П. Ганулич</u> ¹ , В.М. Маслюк ² ¹ <i>Ужгородський національний університет, Ужгород, Україна</i> ² <i>Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна.</i>	<u>106</u>
ОДЕРЖАННЯ НАНОКРИСТАЛІЧНОГО КОМПОЗИТУ В СИСТЕМІ As₂S₃ –Bi₂S₃ <u>С.І. Павлей</u> , А.М. Соломон, С.М. Гасинець, І.М. Войнарович <i>Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна</i>	<u>108</u>
РАДІАЦІЙНИЙ СКРИНІНГ МЕДИЧНИХ ПРИСКОРЮВАЧІВ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ ТЛ-ДОЗИМЕТРІЇ <u>А.В. Русин</u> ¹ , <u>О.Г. Савка</u> ¹ , <u>І.В. Стефанович</u> ¹ , <u>В. Обгук</u> ² , <u>О.М. Поп</u> ³ , <u>В.Т. Маслюк</u> ³ ¹ <i>Комунальне некомерційне підприємство "Закарпатський протипухлинний центр" Закарпатської обласної ради (КНП "ЗПЦ"ЗОР), Ужгород, Україна</i> ² <i>Institute of Nuclear Physics PAN, Kraków, Poland</i> ³ <i>Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна</i>	<u>109</u>

ПЕРЕДМОВА

Наперекір новим викликам часу – спершу пандемії коронавірусу, потім повномасштабному жорстокому вторгненню російської федерації на територію України, – наука залишається рушійною силою прогресу людства. Адже результати новітніх досліджень учених ще раз підтвердили кардинальний вплив на розвиток економіки, медицини, екології, освіти, соціальної сфери, сільського господарства і, що особливо важливо для України, – безпеки держави.

Зараз, як ніколи, нам потрібна активна профорієнтація молоді щодо наукових спеціальностей і трансформація освітніх програм у школах на вміння розв’язувати проблеми, бо це основний показник успішності. Ефективним засобом вияву обдарованої молоді, реалізації їхніх здібностей, активізації навчально-пізнавальної діяльності, обміну досвідом є проведення наукових конференцій. Традиційна міжнародна конференція молодих вчених та аспірантів ІЕФ, яка проводиться в Інституті електронної фізики НАН України вже в одинадцятий раз, стала однією з важливих форм висвітлення підсумків наукової роботи, пов’язаної з проведенням студентами та аспірантами наукових досліджень, підготовкою магістерських проєктів і дисертацій, а також успішних наукових шкільних проєктів.

Молоді вчені – від учениці ліцею до докторів наук – виголосили понад 50 доповідей на міжнародній конференції «ІЕФ–2023», яку Інститут електронної фізики НАН України проводив 15–18 травня 2023 року у змішаному форматі (офлайн і онлайн). Автори з Ужгорода, Києва, Харкова, Дніпра, Біликів (Полтавська область), Львова, Чернівців, Берегова, а також Вільнюса (Литва), Трієста (Італія), Ренна (Франція), Нотінгема (Велика Британія) на високому рівні представили наукові результати з усіх оголошених напрямів конференції:

- *Фізика парних зіткнень електронів, атомів, іонів, молекул і фотонів.*
- *Спектроскопія атомів та молекул.*

- *Нелінійна оптика, лазерна фізика.*
- *Фізико-хімічні основи і технології отримання, оброблення та застосування макроскопічних і мезоскопічних кристалів, плівок та склоподібних матеріалів.*
- *Низькоенергетична ядерна фізика.*
- *Радіаційна і техногенно-екологічна безпека.*
- *Теоретична фізика.*

"Родзинкою" конференції стали оглядові лекції від досвідчених наукових спікерів – провідного наукового співробітника Інституту електронної фізики НАН України Юрія Ажнюка, завідувачки відділу позагалактичної астрономії та астроінформатики Головної астрономічної обсерваторії НАН України члена-кореспондента НАН України Ірини Вавилової, директора «Canberra Packard Ltd» Сергія Самочерниха, професора Ужгородського національного університету Олександра Молнара та наукової співробітниці міжнародного дослідницького центру «Elettra Sincrotrone Trieste» докторки Оксани Плекан, яка особисто приїхала для виступу з Трієста (Італія).

Авторів найкращих наукових доповідей було відзначено дипломами.

Диплом I ступеня – Олег Єрмаков (Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, Харків, Україна).

Диплом II ступеня – Оксана Маньковська (Білицький ліцей №1, Білики, Полтавська область, Україна).

Диплом II ступеня – Ярослав Гречко (Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків, Україна).

Диплом III ступеня – Кароліс Гальванаускас (Центр лазерних досліджень, Фізичний факультет Вільнюського університету, Вільнюс, Литва).

Диплом III ступеня – Артем Грінченко (Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків, Україна).

Диплом III ступеня – Захар Кудринський (Чернівецьке відділення Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Чернівці, Україна; Школа фізики та астрономії Ноттінгемського університету, Ноттінгем, Велика Британія).

Програмний комітет конференції рекомендував цих авторів для безкоштовного опублікування статей у журналі «Науковий вісник

Ужгородського університету. Серія Фізика», який індексується у наукометричних базах Scopus та Google Scholar.

Конференція відбулася без організаційних внесків, натомість кожен з учасників зміг долучитися до збирання коштів на потреби українських військових. Загалом було зібрано 6000 гривень, які передано волонтерам на автівки для Збройних Сил України. Організатори конференції висловлюють вдячність учасникам, слухачам, спонсорам – Управлінню у справах культури, молоді та спорту Ужгородської міської ради, Департаменту освіти і науки, молоді та спорту Закарпатської ОДА, народному депутату Роберту Горвату за фінансову підтримку у проведенні цього важливого наукового форуму та основне – доземний уклін нашим Збройним Силам України, що всі ми маємо змогу працювати, організовувати такі форуми та продовжувати творити науку.

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

Програмний комітет:

Голова - чл.-кор. НАН України Ганна ГОМОНАЙ

Заступник голови - проф. Анатолій ЗАВІЛОПУЛО

Члени програмного комітету:

проф. Олександр ГОМОННАЙ (Україна)

проф. Володимир МАСЛЮК (Україна)

проф. Петер КОПЧАНСЬКИЙ (Словаччина)

д.ф.-м.н. Євген РЕМЕТА (Україна)

д.ф.-м.н. Юрій АЖНЮК (Україна)

др. Валдас ЙОНАУСКАС (Литва)

др. Оксана ПЛЕКАН (Італія)

др. Лаліта ШАРМА (Індія)

др. Шандор ДЕМЕШ (Франція)

Організаційний комітет:

Голова - к.ф.-м.н. Вікторія РОМАН

Заступник голови - к.ф.-м.н. Оксана ПОП

Члени організаційного комітету:

к.ф.-м.н. Тетяна ПОПИК

к.т.н. Наталія СВАТЮК

к.ф.-м.н. Олександр ПАПП

Анатолій МИЛИМКО

Олександр ВАСИЛЬЄВ

Іван МОШКОЛА

Ігор ПИЛИПЧИНЕЦЬ

Євген ОЛЕЙНІКОВ

Петро ЯВОРСЬКИЙ

PREFACE

In spite of the challenges of the recent time – at first the coronavirus pandemic, then the full-scale invasion of the Russian troops in Ukraine, – science remains the driving force for the progress of humanity. Results of novel scientific studies confirm their drastic effect on the development of economy, medicine, environment, education, social life, agriculture and, what is essential for Ukraine, defence and security.

Today we more than ever need active involvement of young people in scientific research and transformation of school education with a focus on solving problems which is the main route to success. Scientific conferences are an efficient means to show scientifically minded young people, help them to disclose their skills and abilities, to promote their learning and cognition, to exchange research experience. The traditional IEP International Conference of Young Scientists and Post-Graduate Students which is held at the Institute of Electron Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, for the eleventh time, has become a platform to present the outcomes of the research work performed by master and Ph.D. students as well as successful research projects of secondary school students.

Young researchers with positions and degrees from a lyceum student to a doctor of sciences have made over 50 talks at the IEP–2023 international conference held at the Institute of Electron Physics on May 15–18, 2023 in a combined (offline and online) format. Authors from Uzhhorod, Kyiv, Kharkiv, Dnipro, Bilyky (Poltava region), Lviv, Chernivtsi, Berehovo as well as Vilnius (Lithuania), Trieste (Italy), Rennes (France), Nottingham (Great Britain) made qualified presentations of their results in all the conference topics:

- *Physics of collisions of electrons, atoms, ions, molecules, and photons.*
- *Atomic and molecular spectroscopy.*
- *Nonlinear optics and laser physics.*
- *Physical and chemical fundamentals and technology of fabrication, treatment, and application of microscopic and mesoscopic crystals, films, and glasses.*
- *Low-energy nuclear physics.*

- *Radiation safety, anthropogenic environmental safety.*
- *Theoretical physics.*

"The icing on the cake" of the conference programme were invited lectures by experienced keynote speakers – Yuriy Azhniuk, senior staff researcher of the Institute of Electron Physics, Iryna Vavilova, Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Ukraine, Head of Department for Extragalactic Astronomy and Astroinformatics of the Main Astronomical Observatory of the National Academy of Sciences of Ukraine, Sergii Samochernykh, CEO of *Canberra Packard Ltd* in Ukraine, Alexander Molnar, Professor of Uzhhorod National University, and Oksana Plekan, a researcher of the international research centre *Elettra Sincrotrone Trieste* who arrived in person from Trieste (Italy) to present her talk at the conference.

The authors of the best presentations were awarded the conference diplomas.

First rank diploma – Oleh Yermakov (V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine).

Second rank diploma – Oksana Mankovska (Bilyky Lyceum No. 1, Bilyky, Poltava region, Ukraine).

Second rank diploma – Yaroslav Hrechko (V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine).

Third rank diploma – Karolis Galvanauskas (Laser Research Center, Physics Faculty Vilnius University, Vilnius, Lithuania).

Third rank diploma – Artem Hrinchenko (V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine).

Third rank diploma – Zakhar Kudrynskyi (Institute for Problems of Materials Science, National Academy of Sciences of Ukraine, Chernivtsi, Ukraine; School of Physics and Astronomy, University of Nottingham, Nottingham, the United Kingdom).

The programme committee of the conference recommended these authors for free-of-charge publishing of their papers in the journal *Uzhhorod University*

Scientific Herald. Series Physics which is indexed by Scopus and Google Scholar science databases.

The conference was a no-fee event, however, each of the participants could make their contribution to funding the needs of Ukrainian Army. 6000 hryvnias, collected at the conference, were transferred to volunteers providing automobiles for the Ukrainian Armed Forces. The conference organizers are grateful to the participants, listeners, and sponsors – Department of Culture, Youth and Sports of Uzhhorod City Council, Department of Education, Science, Youth and Sports of Zakarpatska Region State Administration, to Robert Horvat, a deputy of Verkhovna Rada (the Ukrainian Parliament) for the financial support of the conference, and most of all we are enormously indebted to the Ukrainian Armed Forces for enabling us to organize such scientific meetings and continue our research activity.

Dr. Viktoria ROMAN,
Chair of the Organizing Committee

Programme Committee

Chairperson: Dr. Anna GOMONAI, Corr.
Member Nat. Acad. Sci. Ukr.

Vice Chairperson: Prof. Anatoly ZAVILOPULO

Members of the Programme Committee:

Prof. Alexander GOMONNAI (Ukraine)

Prof. Volodymyr MASLYUK (Ukraine)

Prof. Peter KOPČANSKÝ (Slovakia)

Dr. Eugene REMETA (Ukraine)

Dr. Yuriy AZHNIUK (Ukraine)

Dr. Valdas JONAUSKAS (Lithuania)

Dr. Oksana PLEKAN (Italy)

Dr. Lalita SHARMA (India)

Dr. Sándor DEMES (France)

Organizing Committee

Chairperson: Dr. Viktoria ROMAN

Vice chairperson: Dr. Oksana POP

Members of the Organizing Committee:

Dr. Tetiana POPYK

Dr. Natalia SVATIUK

Dr. Oleksandr PAPP

Anatoliy MYLYMKO

Oleksandr VASYLIEV

Ivan MOSHKOLA

Ihor PYLYPCHYNETS

Yevhen OLEINIKOV

Petro YAVORSKY

ІЕФ-2023

ІЕР-2023

***ТЕЗИ
ДОПОВІДЕЙ***

ABSTRACTS

ВИКОРИСТАННЯ РАМАНІВСЬКОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ НАНОКРИСТАЛІВ

Ю. М. Ажнюк

*Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна
e-mail: yu.azhniuk@gmail.com*

Раманівська спектроскопія сьогодні є одним з поширених і ефективних методів дослідження напівпровідникових нанокристалів. Зокрема, вона є надійним неруйнівним способом ідентифікації хімічного складу та структури нанокристалів, особливо у випадку дослідження нанокристалів, вкраплених у діелектричну матрицю [1, 2], який успішно доповнює рентгенівську дифрактометрію, в ряді випадків забезпечуючи вищу точність, чутливість і швидкість діагностики. Еволюція технічних можливостей методу раманівської спектроскопії [3, 4] сьогодні забезпечує його широке використання не тільки для наукових досліджень, а й для потреб хімічного аналізу, медичної діагностики, дослідження культурно-історичних артефактів тощо.

У цьому побіжному огляді зроблено коротке вступне пояснення явища раманівського розсіювання світла та елементарних збуджень кристалічної ґратки (фононів), які беруть участь у цьому процесі [5], а також розглянуто основні особливості, характерні саме для раманівського розсіювання в нанокристалах [1, 6]. Охарактеризовано причини і прояви розсіювання на фононах з ненульовими хвильовими векторами за рахунок просторового обмеження (конфайнменту) фононів та розсіювання на поверхневих фононах за рахунок високого співвідношення поверхня/об'єм у раманівських спектрах нанокристалів [1, 6]. Продемонстровано ефективність використання раманівської спектроскопії для дослідження процесів інтердифузії атомів між підкладкою та нанокристалом (для епітаксialно вирощених масивів нанокристалів) [7] та дифузії атомів з матриці в нанокристали (для нанокристалів, вкраплених у діелектричну матрицю) [8, 9]. На прикладі нанокристалів типу A^2B^6 показано визначення хімічного складу твердих розчинів з раманівських спектрів для потрійних систем з одномодовим і двомодовим типом композиційної перебудови фононного спектру [10], вказано на використання цих даних для ідентифікації наноматеріалів у історичних артефактах та творах мистецтва [11]. Показано, що раманівська спектроскопія є єдиним методом кількісної ідентифікації хімічного складу багатокомпонентних (четвірних) нанокристалів типу A^2B^6 у скляних матрицях [12]. Показано ефективність раманівської спектроскопії для ідентифікації наногетероструктур типу "ядро/оболонка" та розрізнення їх від потрійних нанокристалів зі структурою типу твердого розчину [13–15].

Раманівська спектроскопія є ефективним методом оцінювання величини механічних напружень, які виникають у вкраплених у матриці нанокристалах за рахунок зовнішнього стиску [16] або розтягу [17]. У матеріалах на основі халькогенідних склоподібних напівпровідників метод раманівської спектроскопії

дозволяє реєструвати локальне утворення напівпровідникових нанокристалів типу A^2B^6 і A^3B^5 у процесі фотохімічних перетворень під дією лазерного випромінювання безпосередньо у процесі вимірювання [17–19], а також інших фотохімічних перетворень на поверхні [20].

- [1] V.M. Dzhagan, Yu.M. Azhniuk, A.G. Milekhin, D.R.T. Zahn, J. Phys. D 51, 503001 (2018).
- [2] R. Cuscó, V. Consonni, E. Bellet-Amalric *et al.*, Phys. Stat. Solidi RRL 11, 7 (2017).
- [3] R. R. Jones, D. C. Hooper, L. Zhang *et al.*, Nanoscale Res. Lett. 14, 231 (2019).
- [4] C. Rathmell, D. Bingemann, M. Zieg, D. Creasey, in: Portable Spectroscopy and Spectrometry 1 (ed. by R. A. Crocombe *et al.*, Wiley, 2021), 115–146.
- [5] D. Tuschel, Spectroscopy 32, 26 (2017).
- [6] A.V. Gomonnai, Yu.M. Azhniuk, V.O. Yukhymchuk *et al.*, Phys. Stat. Solidi B 239, 490 (2003).
- [7] M.Ya. Valakh, V.O. Yukhymchuk, V.M. Dzhagan *et al.*, Nanotechnol. 16, 1464 (2005).
- [8] Yu.M. Azhniuk, A.G. Milekhin, A.V. Gomonnai *et al.*, Phys. Stat. Solidi A 201, 1578 (2004).
- [9] Yu.M. Azhniuk, M.V. Prymak, V. V. Lopushansky *et al.*, Phys. Stat. Solidi B 251, 669 (2014).
- [10] Yu.M. Azhniuk, Yu.I. Hutyk, V.V. Lopushansky *et al.*, J. Phys. Chem. Solids 99, 66 (2016).
- [11] C. Fornacelli, P. Sciau, P. Colombari, Phil. Trans. Roy. Soc. A 374 20160045 (2016).
- [12] Yu.M. Azhniuk, V.V. Lopushansky, M.V. Prymak *et al.*, J. Raman Spectrosc. 48, 485 (2017).
- [13] V. M. Dzhagan, M. Ya. Valakh, A. E. Raevskaya *et al.*, Nanotechnol. 18, 285701 (2007).
- [14] K. Gong, D.F. Kelley, A. Myers Kelley, J. Chem. Phys. 147, 224702 (2017).
- [15] Yu.M. Azhniuk, A.V. Gomonnai, V.V. Lopushansky, D.R.T. Zahn, J. Amer. Ceram. Soc. 103, 692 (2020).
- [16] Yu.M. Azhniuk, Yu.I. Hutyk, V.V. Lopushansky *et al.*, J. Phys. Conf. Ser. 79, 012017 (2007).
- [17] Yu.M. Azhniuk, D. Solonenko, E. Sheremet *et al.*, Thin Solid Films 651, 63 (2018).
- [18] Yu.M. Azhniuk, V. M. Dzhagan, D. Solonenko *et al.*, Phys. Stat. Solidi B 256, 1800298 (2019).
- [19] Yu.M. Azhniuk, V. M. Dzhagan, D. Solonenko *et al.*, Appl. Surf. Sci. 471, 943 (2019).
- [20] Yu.M. Azhniuk, D. Solonenko, V. Loya *et al.*, Appl. Surf. Sci. 467–468, 119 (2019).

EXPERIMENT MEETS THEORY IN REACTIVE ION-MOLECULE COLLISION STUDIES FROM AN ASTROPHYSICAL PERSPECTIVE

S. Demes, S. Carles, A. Mortada, R.A. Jara-Toro, B. Joalland,
A. Benidar, F. Lique & L. Biennier

Univ Rennes, IPR (Institut de Physique de Rennes), UMR 6251, Rennes, France
e-mail: demesh.shandor@gmail.com

Recent astronomical observations have opened a rich chemical complexity in the molecular clouds of the interstellar medium (ISM) [1]. So far, more than 270 different molecules have been detected by radio astronomy in these environments. Most of the detected species are stable neutral molecules (with a static dipole moment), but there are also several radicals and ionic species. The variety and number of the observed cations has increased rapidly in recent years, following the detection of species such as ArH^+ , C_3H^+ , $\text{C}_2\text{N}_2\text{H}^+$, NO^+ , NS^+ , H_3O^+ , etc. While the majority of neutral interstellar molecules are not highly reactive, the ionic species are usually efficiently involved in chemical reactions and thus initiate – or contribute to – the growth of molecular complexity in these specific environments. However, the study of reactive collisions poses many challenges, both experimental and theoretical.

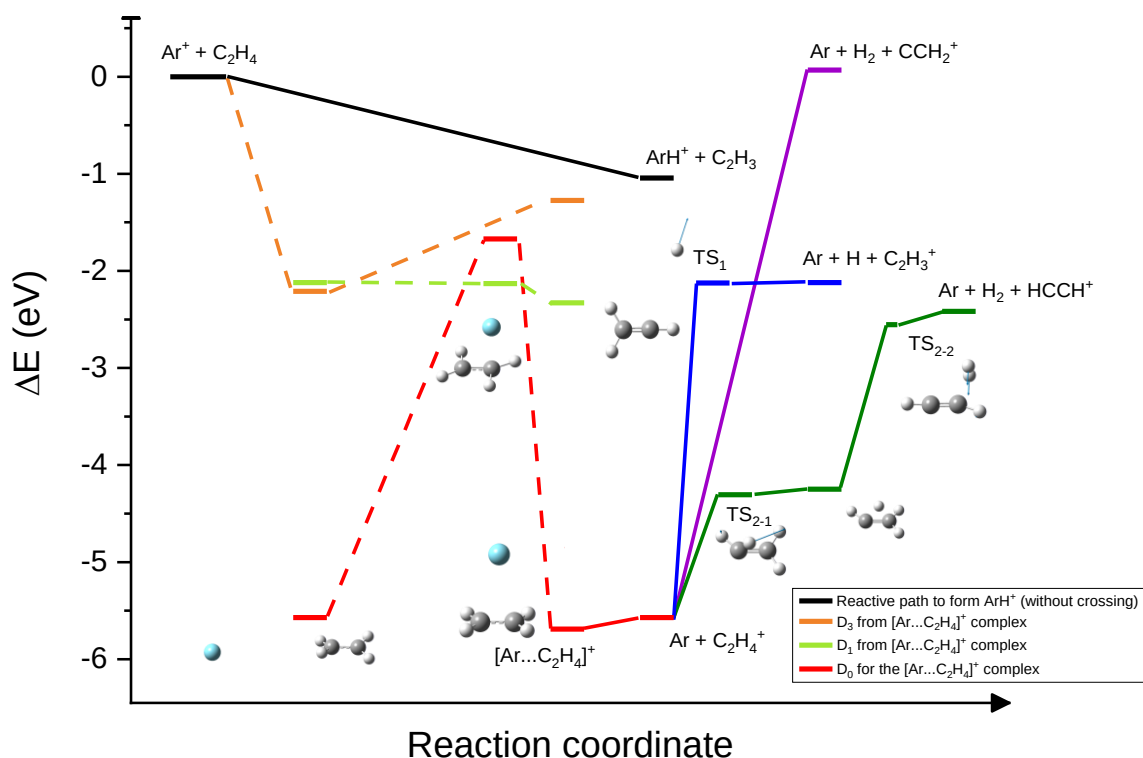


Fig. 1. Energy diagram for the $\text{Ar}^+ - \text{C}_2\text{H}_4$ reaction calculated at the M06-2X / 6-31G(2df,p) level of DFT-theory

Understanding these reactive molecular processes and answering the unknown questions is a great challenge. But combining state-of-the-art laboratory measurements with an in-depth theoretical analysis can be a good approach. We report our recent results obtained by using a unique combination of experimental and theoretical methods in the study of reactive ion-molecule collisions under low-temperature, low-density conditions, with a perspective for astronomical research.

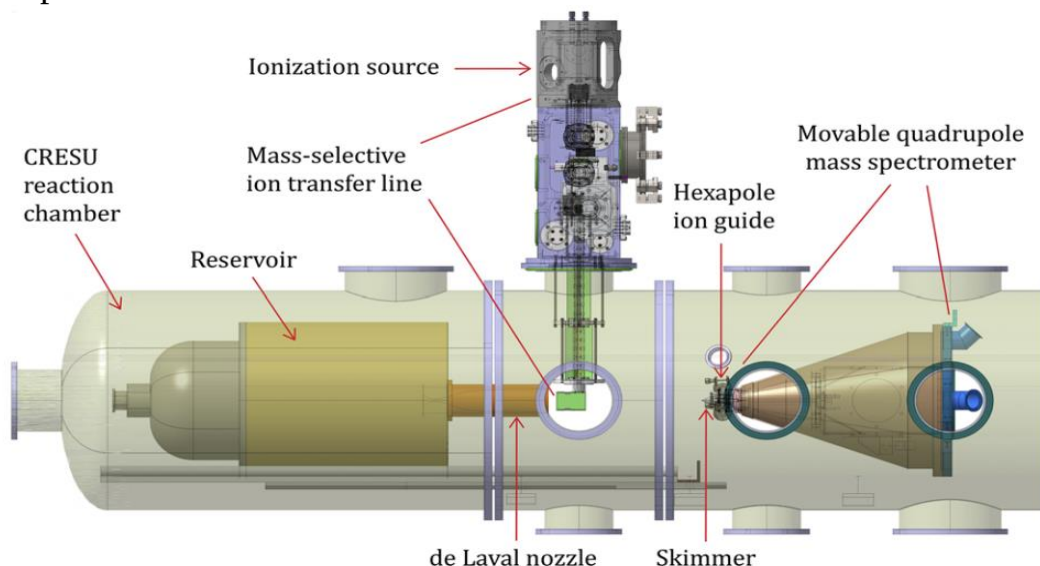


Fig. 2. The CRESU reaction chamber to study ion-molecule reactions

We have developed an original method combining a uniform supersonic flow reactor apparatus (CRESU) with a mass-selective source capable of producing ionic species at thermal energies (down to about 10 K) [2]. The apparatus is equipped with a quadrupole mass spectrometer, which allows the detection of ionic products in the range of 0-100 amu in reactive collisions between molecular ions and neutral species [2]. We combine then high-level *ab initio* theories with transition state theory methods to explore the possible reaction pathways and calculate the reaction rates for each channel. The combination of such experimental and theoretical tools allows one to follow the reaction kinetics and derive precise branching ratios. We have recently studied the reaction of N_2^+ with C_3H_4 [3] and of Ar^+ with C_2H_4 . For both of them we found a significant temperature dependence of the branching ratios.

- [1] E. Roueff Applications: the Molecular Viewpoint of Interstellar Observations in Gas-Phase Chemistry in Space ed. F. Lique & A. Faure (IOP Publishing, Bristol, UK, 2019).
- [2] B. Joalland, N. Jamal-Eddine, D. Papanastasiou, A. Lekkas, S. Carles, and L. Biennier, J. Chem. Phys. 150, 164201 (2019).
- [3] A. Mortada, S. Carles, S. Demes, B. Joalland, F. Lique, A. Benidar, P. Lavvas, and L. Biennier, ACS Earth Space Chem. 6, 1227 (2022).

КОМП'ЮТЕРНА СИМУЛЯЦІЯ ПОГЛИНАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК B_4C ДО КОМПОНЕНТ СПЕКТРУ ГАЛЬМІВНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ МІКРОТРОНА М-30

Є.В. Олейніков, І.В. Пилипчинець, О.О. Парлаг
Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: zheka.net.ua@gmail.com

При вивченні механізму перебігу реакцій фотоподілу актинідів та їх характеристик, що надають важливу інформацію про властивості атомних ядер, широко використовуються пучки гальмівного випромінювання, які отримують на електронних прискорювачах (лінійні, мікротрони) [1]. У пучках гальмівного випромінювання (процес генерації яких відбувається за рахунок радіаційного гальмування електронів у матеріалі конвертера (перетворювача електронів у фотони)), окрім фотонів наявні залишкові електрони та вторинні фотонейтрони [2]. Залишкові електрони при взаємодії з досліджуваними зразками – актинідами – можуть генерувати в них вторинні фотони, які будуть впливати на процес активації. Крім того, вони можуть пошкоджувати досліджувані зразки їх термалізацією. Вторинні фотонейтрони, утворені у можливих каналах електроядерних та фотоядерних реакцій у матеріалі конвертера, можуть генерувати додаткові супутні нейтронні реакції в актинідах, перерізи яких вище перерізів реакцій фотоподілу [3]. Їх внесок може суттєво впливати на точність отриманих експериментальних даних. Тому виникає нагальна потреба в “очистці” пучків гальмівного випромінювання, отриманих на електронних прискорювачах, при проведенні процедури стимуляції реакції фотоподілу актинідів.

Реалізація вказаної задачі досягається шляхом застосування фільтрів (виготовлених з матеріалів, для яких характерні високі енергетичні пороги і малі перерізи взаємодії з гальмівним випромінюванням по каналах фотоядерних реакцій, та їх високою радіаційною стійкістю) для його очистки від залишкових електронів та вторинних фотонейтронів [2]. Як матеріал для фільтра може використовуватися карбід бору, завдяки своїм ядерно-фізичним та технічним характеристикам [4].

У представленій роботі приведені результати комп'ютерної симуляції поглинальних характеристик (коефіцієнта трансмісії) фільтра, виготовленого з порошку карбиду бору (B_4C , радіус – 20 мм, товщина – 18 мм), стосовно гальмівних фотонів, залишкових електронів та вторинних фотонейтронів, наявних у пучках гальмівного випромінювання, утворених при взаємодії прискорених електронів (для енергій – 12.5, 14.5 і 17.5 MeV) з Та-конвертером (прямокутної форми, товщиною – 1 мм). Фільтр з B_4C був розміщений впритул до Та-конвертера по центру осі пучка електронів. Коефіцієнти трансмісії частинок визначалися за відношенням інтегральних значень їх енергетичних спектрів, розрахованих для випадків наявності та відсутності фільтра. Розрахунки проводилися для гальмівних фотонів, залишкових електронів та фотонейтронів, які потрапляли у площину встановлення зразків актинідів при їх опроміненні.

Для проведення комп'ютерного моделювання спектрів фотонів, залишкових електронів та вторинних фотонейтронів була розроблена програма на мові C++ з використанням бібліотеки класів Geant-4 [5]. Програма була реалізована під платформу Windows з використанням режиму багатопотоковості. Розрахунки проводилися з урахуванням конструктивних особливостей та розмірів вузла виводу електронного пучка у повітря мікротрону М-30 [6] для вказаних енергії первинного електронного пучка. Початкова кількість електронів при проведенні моделювань становила – $1\text{E}+8$ при їх рівноімовірному розподілі по площині пучка.

У результаті проведених симуляцій розраховані коефіцієнти поглинання карбідом бору гальмівних фотонів ($\geq 6\text{ MeV}$), залишкових електронів ($\geq 6\text{ MeV}$) та вторинних фотонейтронів (швидкі).

Встановлено, що при використанні B_4C -фільтра в залежності від енергії гальмівного випромінювання ($12.5 \div 17.5\text{ MeV}$) поглинається від 6 до 1 % фотонів та від 99 до 70 % електронів від їх початкової кількості. Розраховані інтегральні значення енергетичних спектрів залишкових електронів ($\geq 6\text{ MeV}$) вказують, що їх внеском у генерацію вторинних фотонів (які також можуть брати участь у додатковій стимуляції реакції фотоподілу) та фотонейтронів на мішенях актинідів можна знехтувати. Поглинання фотонейтронів становить $\sim 30\%$. (Статистика симуляції для кількості початкових подій $\text{E}+8$ не дозволяє дослідити залежність від енергії). Результати моделювання вказують на відсутність деформації енергетичних спектрів фотонів для області енергій від порогів до максимальних значень.

Додатково проведені розрахунки для реального зразка актиноїду (діаметр – 11 мм) при енергії початкових електронів 17.5 MeV. Встановлено процентні частки компонент спектра гальмівного випромінювання, що потрапляють на реальний зразок по відношенню до тих, що попадають у площину встановлення зразка. На реальний зразок при використанні фільтра з B_4C потрапляють 11.1 % гальмівних фотонів, 4.0 % електронів і 0.8 % фотонейтронів.

Розраховані значення коефіцієнтів трансмісії компонент гальмівного випромінювання (гальмівних фотонів, залишкових електронів та вторинних фотонейтронів) для фільтра, виготовленого з B_4C , використані для розробки оптимальних схем стимуляції реакцій фотоподілу актинідів, для яких перерізи нейтронного поділу значно перевищують перерізи фотоподілу, на електронних прискорювачах.

- [1] A. Zilges et al. Progress in Particle and Nuclear Physics, 122, 103903 (2022).
- [2] І.В. Пилипчинець та ін., НБУЖУ, сер. Фізика 45, 50 (2019).
- [3] Evaluated Nuclear Data File (ENDF). Database Version of 2022-04-20. <https://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm>
- [4] О.О. Парлаг та ін., Патент України на корисну модель № 96384. 10.02.2015.
- [5] GEANT4 10.7 (4 December 2020). <https://geant4.web.cern.ch/support/download>
- [6] М.І. Романюк та ін., Журнал фізичних досліджень 26, 1201 (2022).

HIGH-TRANSPARENCY AND RESILIENCE 3D MICRO-OPTICS OF HYBRID-POLYMER SZ2080™: MADE VIA ULTRAFAST LASER NANOLITHOGRAPHY, CALCINATION AND ATOMIC LAYER DEPOSITION

K. Galvanauskas, D. Astrauskytė, R. Žvirblis, G. Balčas,
D. Gailevičius, L. Grinevičiūtė, M. Malinauskas

*Laser Research Center, Physics Faculty Vilnius University, Vilnius, Lithuania;
Optical Coatings Laboratory, Center for Physical Sciences and Technology,
Vilnius, Lithuania*

e-mail: karolis.galvanauskas@ff.stud.vu.lt

Laser Direct Writing (LDW) allows fabrication of complex free-form structures, particularly advantageous in micro-optic applications when used in conjunction with high-optical performance polymers, such as SZ2080™ [1]. Nonetheless, high-complexity and integrated micro-optical elements often manifest multiple interfaces, resulting in increased Fresnel reflection losses, that are mitigated by Anti-Reflection coatings in conventional optics. Conventional coating processes are incapable of producing uniform coatings on micrometer-scale complex structures.

In this study, we propose the use of Atomic Layer Deposition (ALD) combined with LDW for the fabrication of highly efficient anti-reflective (AR) coated functional free-form sub-100 μm micro-optical elements, including multi-layer platforms and triplet objectives. Fig. 1 gives an overview of the fabrication process and Fig. 2 – the resulting final functional triplet objective. Tenfold miniaturization in comparison with prior publications [2] has been achieved.

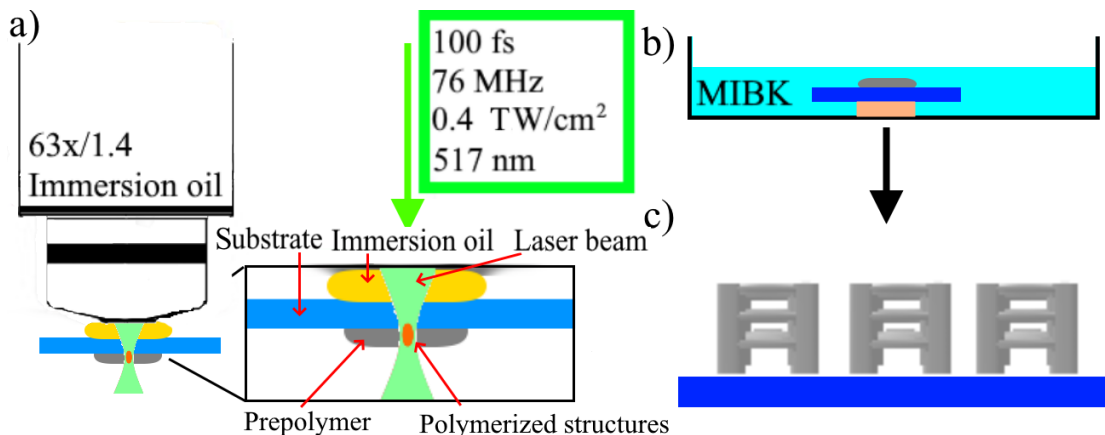


Fig. 1. Experiment overview: a) LDW 3D nano-fabrication setup; b) sample development in MIBK, c) produced final structures.

We demonstrate that 60°C low-temperature deposition of aluminum oxide and titanium oxide AR coatings using ALD is compatible with high-performance polymer SZ2080™ structures fabricated using LDW. No loss of optical function was observed, and a substantial increase in transmittance, up to 99.9% per interface, was achieved.

These findings are suitable for use in highly efficient compound micro-lens arrays, greatly integrated solutions, and low-loss photonic components, making them readily available for Photonic Integrated Circuits (PICs) [3].

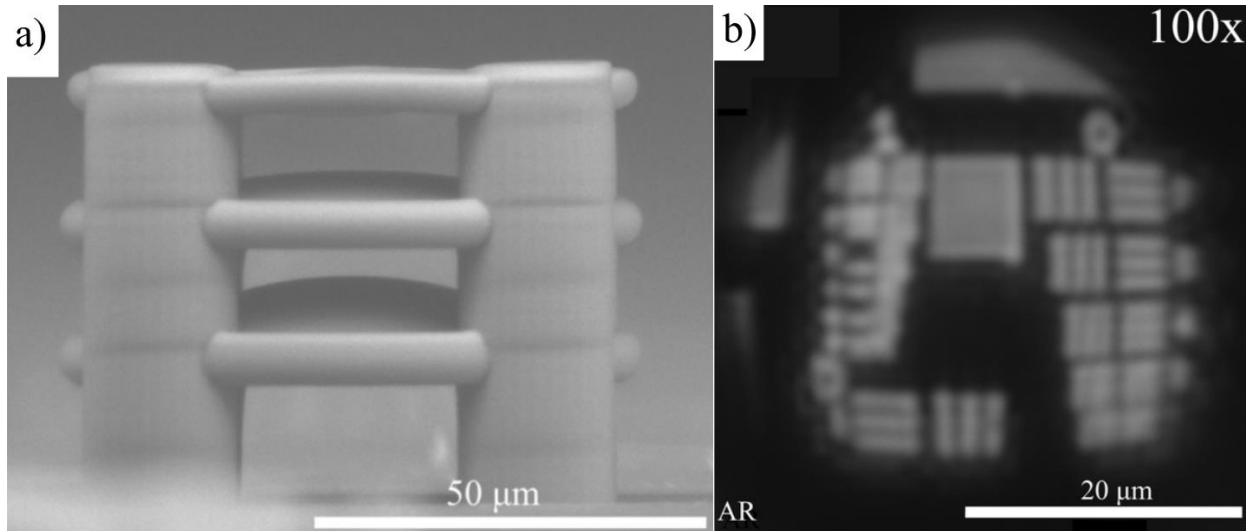


Fig. 2. Final structure: a) Scanning Electron Microscope image of an AR coated triplet, b) USAF 1951 image viewed through a triplet.

Furthermore, heat treatment (calcination) of SZ2080™ polymer turns hybrid structures into functional inorganic glass-like elements, improving their Laser-Induced Damage Threshold (LIDT) up to 6.5 times. A pilot study in calcinated resilient micro-optics will be presented along [4].

Based on the study described in the text, it can be concluded that the combination of ALD and LDW can be used to fabricate highly efficient AR coated sub-100 μm complex micro-optical elements. Additionally, calcination of polymer structures greatly improves their LIDT.

- [1] D. Gonzalez-Hernandez, S. Varapnickas, A. Bertoncini, C. Liberale, M. Malinauskas, *Advanced Optical Materials* 11(1), 2201701 (2022).
- [2] S. Ristok, P. Flad, H. Giessen, *Optical Materials Express* 12(5), 2063 (2022).
- [3] K. Galvanauskas, D. Astrauskyte, G. Balcas, D. Gailevičius, L. Grinevičiute, M. Malinauskas, Preprint (2023).
- [4] D. Gailevičius, R. Žvirblis, K. Galvanauskas, M. Malinauskas, Preprint. (2023).

ІСТИННИЙ МЮОНІЙ ТА КІНЕМАТИЧНА СИМЕТРІЯ В ЗАДАЧІ ТРЬОХ ТІЛ

А.І. Гайсак¹, М.І. Гайсак²

¹Ужгородський національний університет, Ужгород

²Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

e-mail: andrii.haisak@uzhnu.edu.ua

Історично термін «мюоній» закріпився за досить добре дослідженою теоретично і експериментально екзотичною атомною системою (μ^+ , e^-). Тому для гіпотетичної атомної системи (μ^+ , μ^-) пропонується вживати термін «істинний/справжній мюоній» (true muonium). На експериментальні пошуки теоретично передбаченого істинного мюонію [1,2] націлено ряд дослідницьких груп [3,4]. Очікується, що експериментальне вивчення параметрів найменшої атомної системи може привести за межі Стандартної моделі.

Параметри атомних систем, які складаються з частинки і античастинки ((e^+, e^-) , (μ^+, μ^-) , (π^+, π^-) , ...) визначаються тільки масою частинки. Це означає, що всі такі системи описуються одним і тим же безрозмірним рівнянням Шредінгера, в якому вважаємо $\hbar=e=m=1$. Тобто актуальні фізичні величини задаються модифікованою атомною системою одиниць, в якій масштаб задається масою частинки.

Аналогічна ситуація виникає для атомних систем трьох частинок. Рівняння Шредінгера для трьох частинок визначається двома додатковими особливими точками, положення яких залежить від відношення мас компонентних частинок [5]. Для систем із частинок однакової маси положення особливих точок диференціального рівняння не змінюється. Це дає нам можливість за величинами задовільних параметрів системи (енергії, розміру, ...), отриманими в атомній системі одиниць чисельним методом для іона позитронію (e^+ , e^- , e^-) [6], визначати ці ж параметри для систем із трьох мюонів, піонів, τ -лептонів тощо.

[1] V.N. Baier and V.S. Synakh, Sov. Phys. JETP 14, 1122 (1962).

[2] S.J. Brodsky and R.F. Lebed, Phys. Rev. Lett. 102, 21301 (2009).

[3] H. Lamm and Y. Ji, EPJ Web of Conf., 181, 01016 (2018).

[4] X.C. Vidal, P. Ilten, J. Plews, B. Shuve, and Y. Soreq, Phys. Rev. D 100, 053003 (2019).

[5] M.I. Haysak, I.I. Haysak, M. Nagy, V.V. Onysko, Acta Phys. Pol. A 142, 549(2022).

[6] G.V.F. Drake and M. Grigorescu, J. Phys. B 38, 3377(2005).

СПЕКТРАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ МОЛЕКУЛИ ГЛЮТАМІНУ

І. Мошкола¹, М. Свириба¹, О. Молнар², О. Шпеник², О. Гомонай¹

¹Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

²ДВНЗ «Ужгородський національний університет»

e-mail: moshkola96@gmail.com

Глютамін є найбільш розповсюдженою в організмі людини амінокислотою, що приймає участь у біосинтезі білків, інших амінокислот і глюкози. Він є нейромедіаторною речовиною і бере активну участь в азотистому обміні, виробленні пуринів та регуляції кислотно-лужного балансу в організмі. Глютамін є типовим біомаркером, який відіграє життєво важливу роль при нирковій і м'язовій дисфункціях. Аномальний рівень глютаміну в організмі людини викликає ріст ракових клітин. Тому рівень глютаміну в людському організмі, зокрема крові і сечі, є важливим параметром клінічної діагностики. Є різні методи визначення вмісту глютаміну в біоматеріалах. Одним з чутливих і швидких методів є метод флуоресцентного аналізу. Тому вивчення спектральних характеристик молекули глютаміну є актуальним.

Дослідження проводилися на спектрофлюорофотометрі "Shimadzu RF-6000". Для запобігання попадання розсіяного УФ випромінювання збудження (240–380 нм) у вимірювальний монохроматор, перед його входною щілиною встановлювався світлофільтр ЖС-11 (область пропускання ≥ 400 нм, коефіцієнт пропускання ≥ 92 %).

На рис. 1 наведено спектри фотолюмінесценції водного розчину глютаміну, виміряні при різних довжинах хвилі збуджуючого випромінювання.

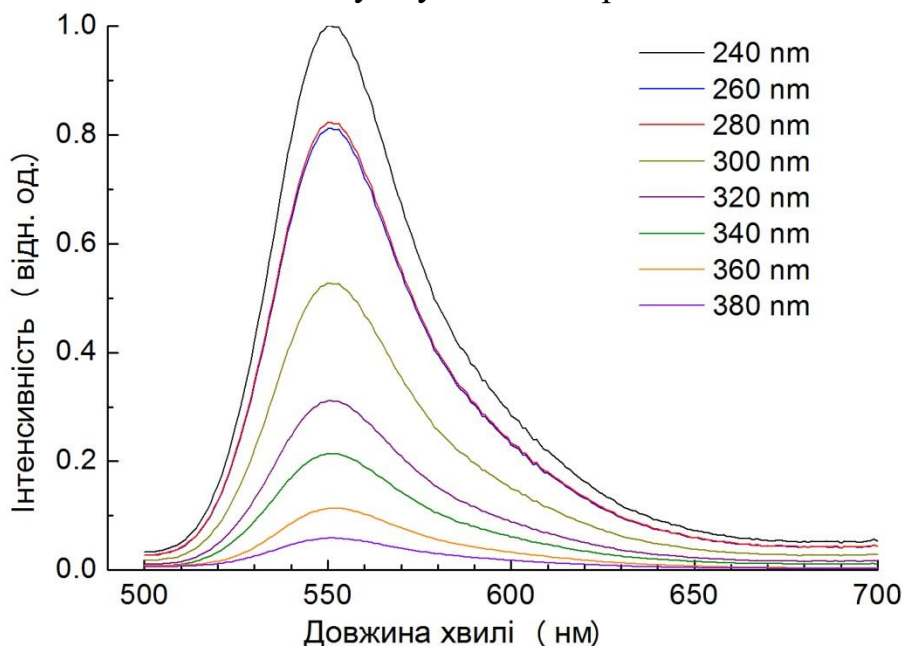


Рис. 1. Спектри фотолюмінесценції водного розчину глютаміну, виміряні при різних довжинах хвилі збуджуючого випромінювання.

Спектри нормовані на інтенсивність збуджуючого випромінювання і на максимальний сигнал фотолюмінесценції для довжини хвилі 240 нм. Інтенсивність збуджуючого випромінювання визначалася за площею полос, що спостерігалися у другому порядку дифракції (480–760 нм), при опроміненні кювети з дистильованою водою.

Як бачимо, спектр фотолюмінесценції являє собою широкий асиметричний максимум на довжині хвилі 551 нм, висота якого залежить від довжини хвилі збуджуючого випромінювання.

Функцію збудження люмінесценції на довжині хвилі 551 нм наведено на рис. 2.

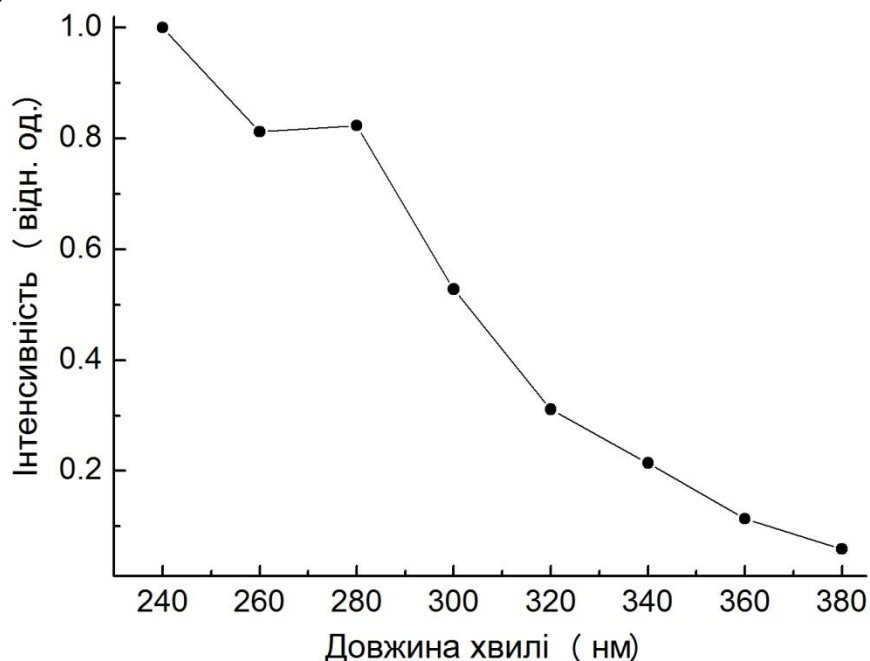


Рис. 2. Функція збудження люмінесценції на довжині хвилі 551 нм.

Як бачимо, залежність має немонотонний характер. Максимальна інтенсивність спостерігається для збуджуючого випромінювання 240 нм. Після незначного зменшення (260 нм) інтенсивність знову дещо збільшується при 280 нм. З подальшим зростанням довжини хвилі збуджуючого випромінювання інтенсивність фотолюмінесценції на довжині хвилі 551 нм поступово зменшується. Такий хід цієї залежності, на наш погляд, узгоджується зі спектром поглинання водного розчину глютаміну [1].

Що стосується природи спостережуваного максимуму на довжині хвилі 551 нм, то наразі це питання залишається відкритим. Попередні висновки, які можна зробити, полягають у наступному. По-перше, дуже велика різниця між довжинами хвиль довгохвильової смуги поглинання (270 нм) і смуги люмінесценції (551 нм) вказує на те, що спостережуване свічення не є результатом радіаційного переходу між першим збудженим і основним синглетними рівнями молекули глютаміну. По-друге, асиметрична форма спостережуваного максимуму вказує на те, що він, скоріш за все, відповідає більш ніж одному оптичному переходу.

[1] S.L. Pahuja, J. Albert, T.W. Reid, J. Liquid Chromatography 7:11, 2261 (1984).

ГІБРИДНІ НАНОСТРУКТУРИ $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Au}$ ТА $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Ag}$ ДЛЯ РЕАЛІЗАЦІЇ ЕФЕКТІВ ПОВЕРХНЕВО ПІДСИЛЕНОЇ КОЛИВАЛЬНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ

М. Раллєв¹, О. Фесенко¹, А. Яремкевич¹, О. Лавриненко²

¹SES лабораторія, Інститут фізики НАН України, Київ.

²Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України.

Email: RallevM@nas.gov.ua

Наночастинки Fe_3O_4 є суперпарамагнітним матеріалом, який широко використовувався як у біомедицині для цільової доставки ліків та імуноаналізів, так і у промисловості для каталітичного розкладання, рекультивациі підземних вод і обробки небезпечних відходів. У цій роботі ми вивчали можливості використання гібридних наноструктур Fe_3O_4 , модифікованих золотом та сріблом для підсилення Раманівського сигналу різних біологічних молекул. Як тестові молекули використовувалися гліцин та тимін. Гібридні наночастинки $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Au}$ та $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Ag}$ були синтезовані за допомогою методу обертально-корозійного диспергування. Характеризацію зразків проведено за допомогою рентгенографічного методу, мікроскопії, ІЧ та Раманівської спектроскопії, а також спектроскопії видимого діапазону. ІЧ спектри вимірювалися на Фур'є спектрометрі "Bruker" (Німеччина), спектри раманівського розсіювання досліджувалися на міксо-Raman спектрометрі "Renishaw" (Великобританія) з використанням лазера $\lambda=633$ нм, спектри видимого діапазону отримувалися на спектрометрі Shimadzu (Японія).

Ми досліджували спектри комбінаційного розсіювання тиміну та гліцину на гібридних комплексах $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Au}$ та $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Ag}$ (див. рис. 1 та 2).

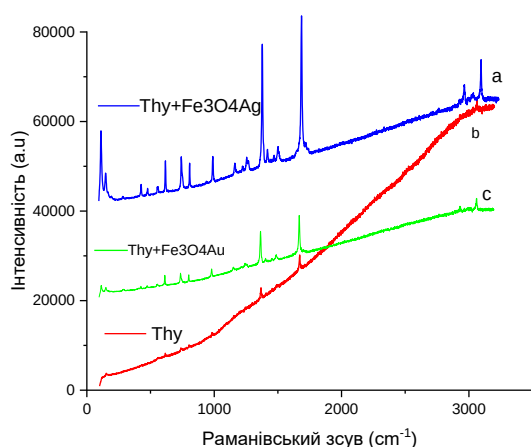


Рис. 1. Раманівські спектри наночастинок тиміну на: а – $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{Ag}$; б – чистий Thy; с – $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{Au}$. Концентрація розчину – 1 мг/мл.

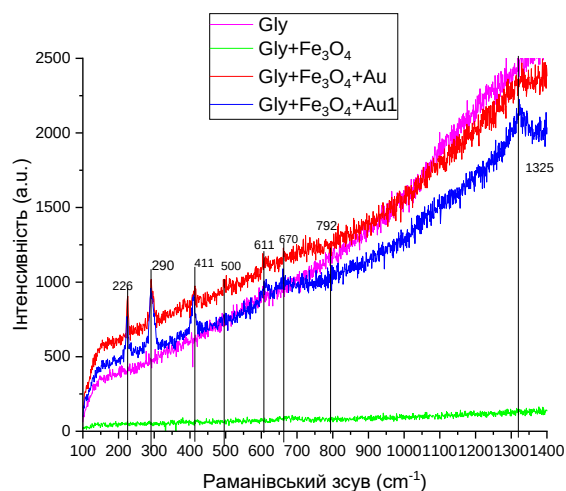


Рис. 2 Раманівські спектри наночастинок гліцину з різними комплексами: а – чистий Gly; б – $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{Au}$; с, d – Fe_3O_4 . Висаджено 15,7 нг/м² гліцину.

Основні результати роботи:

1) Нами показано, що гібридні наночастинки $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Au}$ та $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Ag}$ можуть бути використані як SERS підкладинки для детектування біологічних молекул.

2) Отримано підсилення Раманівського сигналу від тиміну (Thy) та гліцину (Gly), адсорбованих на ці гібридні наноструктури. Визначено, що різні молекулярні групи підсилюються по-різному, залежно від типу взаємодії та орієнтації молекули відносно поверхні. Як свідчать результати досліджень, отримані наногібриди володіють властивостями благородних металів, на яких збуджуються плазмонні коливання та зберігають при цьому магнітні властивості.

3) Показано, що Gly хімічно адсорбується на Fe_3O_4 , а саме карбоксилатна група зв'язана з катіонами заліза на поверхні наночастинок симетрично через два атоми кисню, де група COO- утворює мостовий бідентатний тип ковалентного зв'язку. Це свідчить про те, що гліцин хемосорбується на поверхню наночастинок Fe_3O_4 через карбоксилатну групу, залишаючи вільно відкриті амінні ($-\text{NH}_2$) групи.

4) Наноконплеси $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Au-Gly}$ мають активні функціональні групи ($-\text{NH}_2$) на поверхні, які не лише стабілізують наночастинки $\text{Fe}_3\text{O}_4\text{-Au}$, але й забезпечують доступну поверхню для звичайної кон'югації біомолекул/ліків через добре розроблену хімію біокон'югації для ряду біомедичних застосувань. Висока водна колоїдна стабільність, низька токсичність і хороша здатність до самонагрівання роблять ці нові наночастинки придатними також для гіпертермічного лікування раку.

5) Покриття з благородних металів, здатних підтримувати локальні плазмонні коливання, на поверхні магнітних НЧ зберігають їх властивості та покращують біосумісність. Отже, застосування гібридних магнітно-плазмонних НЧ дозволяє використовувати комплекс унікальних властивостей їх складових і реалізовувати нові властивості, що виникають внаслідок взаємного впливу компонентів.

З одного боку, отримані нами результати можна використати для розробки чутливих SERS підкладок для детектування та аналізу надмалих кількостей хімічних реагентів. З іншого боку, за рахунок високих адсорбційних властивостей Fe_3O_4 , подібні структури можуть використовуватися як моніторинг та фільтри для захоплення та детектування шкідливих речовин у середовищі. Одержані в роботі результати можуть бути використані в біології для розробки біочіпів і біосенсорів (визначення нуклеїнових кислот, білків і метаболітів) та у медицині (скринінг лікарських речовин, виявлення антитіл і антигенів, діагностика інфекцій).

ОСОБЛИВОСТІ РАДІОНУКЛІДНОГО СКЛАДУ НАМУЛІВ ГІРСЬКИХ ВИТОКІВ р. ТИСА (ЗАКАРПАТТЯ, УКРАЇНСЬКИЙ МАСИВ)

Н.І. Сватюк¹, В.Т. Маслюк¹, О.І. Симканич², О.А. Тарнай¹, М.П. Візенко¹

¹*Інститут електронної фізики Національної академії наук України, Ужгород*

²*ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород*

e-mail: svatiuknatalia@gmail.com

Відомою є висока інформативність радіоекологічного моніторингу щодо екологічного стану, безпеки, структури наземної радіоактивності за вмістом не лише хімічних елементів, але й їх ізотопів, впливу як геохімічних, так і техногенних показників на склад об'єктів довкілля. Закарпаття є унікальним регіоном, гірські ділянки якого є важливим чинником формування повітряних і водних ресурсів Східної та Центральної Європи. Гірські річки є важливим елементом природної екосистеми, який визначає особливості життєдіяльності населення та господарського освоєння її басейну. Саме тому радіоекологічний стан поверхневих вод і прилеглих територій є важливим предметом наукових досліджень. Особлива важливість подібних досліджень відчутна для водного басейну та прилеглих територій р. Тиса, яка бере початок у гірських районах Українських Карпат. Тиса – одна з великих приток Дунаю. Її довжина – 966 км. На території України розташовано лише верхів'я річки, довжина якого складає 201 км. Тиса починається на північ від м. Рахів і формується злиттям річок Чорна і Біла Тиса та приймає свої праві притоки: Тересву, Теремлю, Ріку, Боржаву, Латорицю та Уж. Всі вони своїми руслами прорізають гори й разом з водами несуть каміння, пісок, намул, які відкладаються в низов'ях рік. Особливістю річки Тиса є те, що велика протяжність її водозбору проходить по кордону з Румунією та Угорщиною. Ще однією суттєвою відмінністю гірських річок є значна кількість твердого стоку, який транспортується руслом річок, у вигляді гальки та розмитої глини (завислі мулові та піщані частинки).

Міграція радіоактивних елементів з водою, відбувається при переміщенні радіоактивних частинок з водним потоком, а також шляхом переміщення розчинних форм радіоактивних речовин на площі, що розташована нижче місця виносу. Донні осади містять багато органічної речовини та мінерального колоїдного матеріалу, а тому є хорошими сорбентами і, певною мірою, фіксують радіонуклідний склад води. Оскільки віддаль між точками пробовідбору не перевищує 5–15 км, це дозволяє встановити джерела та шляхи потрапляння радіонуклідів у донні відкладення досліджуваної річки.

Для радіоекологічного дослідження річки Тиса було вибрано схему з початком пробовідбору у верхів'ї річки (вище села Ясіня), де вплив людини на

екосистему найменший; інші ж точки вибираються нижче за течією річки, де антропогенне навантаження зростає за рахунок збільшення густоти населення, кількості неочищених стічних вод, що відводяться в річку, зростання кількості неконтрольованих сміттєзвалищ вздовж берегів та зменшення лісистості. Крайньою точкою дослідження для річки Тиса є точка в селі Вилोक (кордон з Угорщиною).

Вимірювання серій гамма-спектрів донних відкладів басейнів річки Тиса проводилися на спектрометричному комплексі “ORTEC” з HPGe-детектором об’ємом 150 см³. Під час проведення вимірів постійно здійснювався контроль дрейфу енергетичної шкали, роздільної здатності та ефективності реєстрації спектрометричного комплексу за допомогою точкових стандартних гамма-активних джерел ⁵⁷Co та ⁶⁰Co. Дрейф указаних параметрів не перевищував 1%.

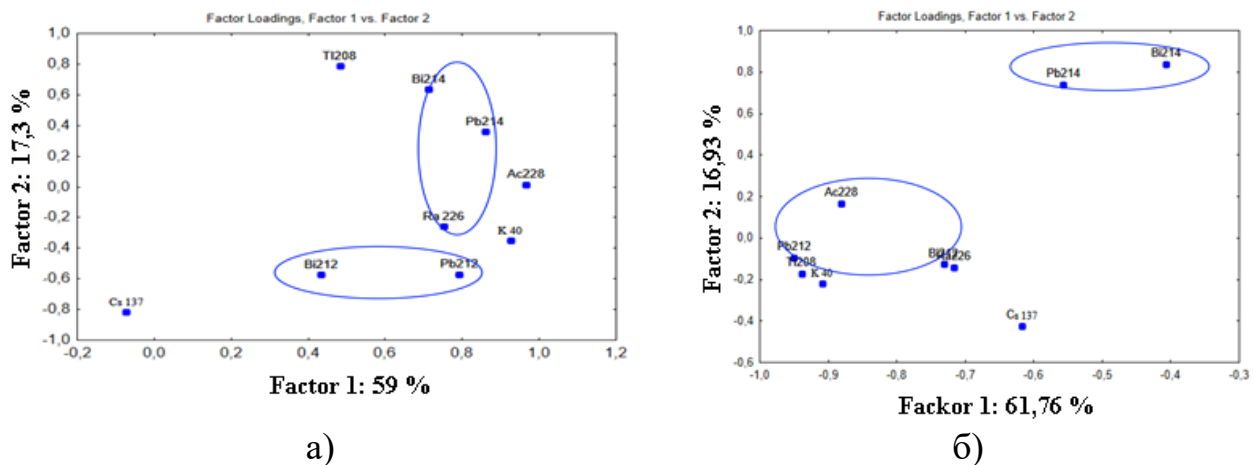


Рис. 1. Експериментальні результати факторного аналізу
а) Чорна Тиса; б) Біла Тиса

Рисунок 1 ілюструє результати факторного аналізу ділянки Чорної Тиси. З результатів слідує, що для верхньої ділянки досліджуваної ділянки р. Тиса ступінь близькості між природними радіоактивними рядами U\Th та ⁴⁰K є більшою, ніж у низинних її ділянках, причому на кореляцію між природними рядами техногенна складова ¹³⁷Cs не вносить вкладу. Отримані результати радіоекологічного дослідження є дуже важливими, оскільки вони дозволяють не тільки оцінити вплив продуктів техногенної діяльності як атомних, так і теплових електростанцій в Україні та країнах Європи, але й контролювати рівень небезпеки для населення краю від радіоактивного забруднення, що переноситься на значні віддалі повітряними потоками.

ДОСЛІДЖЕННЯ ЦЕНТРІВ ЗАБАРВЛЕННЯ У ДОЗИМЕТРАХ ДТГ (LiF: Mg, Ti), ОПРОМІНЕНИХ ЕЛЕКТРОНАМИ З ЕНЕРГІЄЮ 18 MeV

О.М. Поп, І.Г. Мегела, Й.Й. Гайніш, М.П. Візенко

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

Відомо, що термолюмінесценція (ТСЛ) опромінених кристалів LiF, легованих Mg, Ti, використовується для індивідуального дозиметричного контролю персоналу. Також вивчається можливість їх використання у клінічній та технологічній дозиметрії, наприклад, за їх оптичними характеристиками. Зміна оптичного поглинання зразків LiF: Mg, Ti, опромінених гамма-квантами джерелом ^{60}Co до доз $2,83 \times 10^5$ Гр, досліджена у роботі [1].

У даній роботі вивчається можливість використання зміни оптичного поглинання в опромінених кристалах ДТГ (LiF: Mg, Ti) для клінічної та технологічної дозиметрії. З цією метою кристали ДТГ (LiF: Mg, Ti) опромінювались на мікротроні М-30 енергією 17,5 MeV флюенсами $1 \times 10^{12} - 1 \times 10^{14}$ ел $^{-1}$, що відповідає поглинутим дозам порядку 10^5 Гр. Опромінення електронами здійснювалось на мікротроні М-30 відділу фотоядерних процесів Інституту електронної фізики НАН України. Поле опромінення створювалося розсіюванням виведеного пучка на тонкій танталовій мішені товщиною 50 мкм з використанням формуючого коліматора, який покращував однорідність електронного пучка на місці встановлення зразків. Опромінення електронним пучком відбувається у супроводі гальмівного опромінення гамма-квантами. Флюенс на місці встановлення зразків визначався за струмом прискорених електронів, який вимірювався циліндром Фарадея з каліброваним вхідним отвором. Циліндром Фарадея калібрувався прозорий монітор вторинної емісії, під'єднаний до інтегратора струму.

У даній роботі представлено результати дослідження оптичного поглинання зразків ДТГ, яке вимірювалися спектрофотометром СФ-46. Досліджено стандартні зразки ДТГ (LiF: Mg, Ti) діаметром 5 мм товщиною 1 мм. Як і при опроміненні гамма-квантами [1], при опроміненні високоенергетичними електронами спостерігається однакові центри забарвлення: при менших дозах – F-центри (240 нм), які приписуються вакансії F, що захопила електрон, та R-центр (310 нм) – агрегат F-центрів; при більших дозах утворюється M-центр (450 нм) – належить бівакансії F. При цьому опромінений зразок змінив колір на червоний. При збільшенні флюенсу $> 1 \times 10^{15}$ колір змінюється на зелений, що зумовлено утворенням смуги поглинання при 630 нм. Цей центр не є стабільним, інтенсивність його зменшується з часом зберігання зразка.

Для визначення концентрації центрів забарвлення F_1 в залежності від дози опромінення використано співвідношення Смакули-Декстера.

[1] Lakshmanan A.R. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 83, 196 (1993).

МЕТОДИКА ТЕРМОІОННОГО НАНЕСЕННЯ ПОКРИТТІВ З ПОПЕРЕДНІМ БОМБАРДУВАННЯМ ПОВЕРХНІ ПІДКЛАДКИ ПОТОКОМ НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНИХ ІОНІВ

Я.О. Гречко, І.М. Середа, Є.В. Бабенко, М.О. Азаренков

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків
e-mail: ya.hrechko@karazin.ua

Вакуумно-плазмові методи нанесення функціональних покриттів широко використовуються для підвищення надійності та довговічності деталей машин і механізмів, різального інструменту, технологічного оснащення, а також у сучасній мікро- та наноелектроніці для нанесення струмопровідних та діелектричних шарів різної товщини [1].

Окреме місце серед існуючих вакуумно-плазмових методів нанесення посідає електронно-променевий метод, який за умов фокусування електронного пучка дозволяє отримувати високу (до 10^8 Вт/см²) концентрацію потужності на мішені та високу температуру, забезпечуючи при цьому високу швидкість випаровування навіть найбільш тугоплавких матеріалів. Проте основним його недоліком є небезпека електричного пробоя, що виникає при транспортуванні прискореного до 20 кВ потужного електронного пучка, та критичність прискорюючої системи до стрибків тиску. Альтернативою такого методу є плазмовий електронно-променевий метод, де емітером електронів служить плазма, а прискорення пучка відбувається у приповерхневому шарі об'ємного заряду мішені, що випаровується [2]. Потужність нагріву в цьому випадку регулюється як прикладеною до мішені порівняно низькою напругою (до 1 кВ), так і струмом електронного пучка, який залежить від густини плазми. Причому нагрів зразка здійснюється рівномірно з усіх боків, а операційні ризики щодо електричного пробоя виявляються некритичними до стрибків тиску при випаровуванні речовини.

Важливим чинником технологічного процесу нанесення покриттів є також підготовка поверхні, що включає окрім механічного очищення ще й бомбардування поверхні підкладки інтенсивним потоком низькоенергетичних іонів. Цей метод сприяє розігріванню поверхні до необхідної температури, дозволяє видалити не тільки всі поверхневі домішки, а й забезпечує очищення верхнього шару кристалічної решітки приблизно на глибину в декілька нанометрів, не змінюючи при цьому її структуру. Обидва ці ефекти забезпечують високий ступінь адгезії покриттів до поверхні підкладки та зменшення внутрішньої напруги покриття [3].

Нами запропонована методика нанесення покриттів, яка поєднує в одному технологічному циклі процеси іонного очищення поверхні потоком

низькоенергетичних іонів та плазмового електронно-променевого випаровування речовини. Причому формування та прискорення потоків заряджених частинок відбувається в обох випадках у шарі об'ємного заряду безпосередньо біля поверхні. Передбачається, що така методика дозволить створювати та обробляти функціональні покриття без радіаційних пошкоджень для покращення їх технологічних характеристик.

Для вивчення механізму приповерхневого формування інтенсивного іонного потоку низької енергії для попереднього очищення поверхні перед нанесенням покриття було досліджено густину іонного струму з плазми, створеної джерелом на основі дугового розряду з термокатодом. Визначені залежності густини іонного струму від початкових параметрів експерименту. Наведені результати обробки поверхні зразка (TiZr/TiSi)N потоком іонів із плазми. Отримані зображення зі скануючого електронного мікроскопа показали, що така обробка призводить до очищення поверхневого шару від різних забруднень без пошкоджень і створює підкладку для подальшого термоіонного осадження покриття з високим ступенем адгезії.

Процес термоіонного нанесення покриттів включає в себе формування густої (до 10^{14} см^{-3}) термоіонної плазми, за рахунок випаровування речовини, яка в подальшому осаджується на підкладку у вигляді покриття. Були проведені дослідження механізму термоіонного осадження моношару на попередньо очищену іонним бомбардуванням підкладку. Як матеріал, що випаровується, був вибраний титан, який осаджувався на підкладку з нержавіючої сталі. Виявлені на порядок вищі значення іонного струму на підкладку при формуванні термоіонної плазми свідчать про суттєве підвищення швидкості процесу нанесення. Це пояснюється тим, що при формуванні термоіонної плазми відбувається утворення подвійного шару об'ємного заряду [2], який прискорює іони від поверхні речовини, що випаровується, до підкладки, а також наявністю додаткового механізму генерації іонів у всьому об'ємі камери в умовах розвитку несамотійного тліючого розряду, який було виявлено у попередніх дослідженнях [4].

Отримані зображення поверхні зразка зі скануючого електронного мікроскопа показали, що покриття титану при термоіонному нанесенні рівномірно розподілене по поверхні підкладки, без наявної крапельної фази.

[1] О.Б. Гасій, Науковий вісник НЛТУ України 28, 85 (2018).

[2] I.V. Borgun, et al., Problems of Atomic Science and Technology 4, 61 (2013).

[3] V.A Belous, et al., East European Journal of Physics 4, 98 (2018).

[4] I.N. Misiura, et al., Problems of Atomic Science and Technology 6, 149 (2014).

ВЗАЄМОДІЯ ЕЛЕКТРОНІВ НИЗЬКИХ ЕНЕРГІЙ З МОЛЕКУЛАМИ ЛЕЙЦИНУ ТА ІЗОЛЕЙЦИНУ

Б.П. Баленко, Л.Г. Романова, О.В. Папп, В.С. Вукстич

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

Елементарні процеси взаємодії електронів різного діапазону енергій з біологічними молекулами, які входять до складу живих організмів, дають важливу інформацію про перебіг процесів біохімічного характеру в клітині під дією іонізуючого випромінювання. Низькоенергетичні електрони здатні викликати руйнування або зміни конфігурації амінокислот, які є елементарними структурними одиницями білкових молекул, що призводить до розривів молекулярних зв'язків у поліпептидних ланцюгах білків [1]. Визначення енергії появи іонізованих фрагментів молекул внаслідок дисоціації при мас-спектрометричних дослідженнях дає можливість отримати порогові величини енергій електронів, при яких відбуваються розриви внутрішньомолекулярних зв'язків і можуть використовуватися для моделювання реакцій розпаду біополімерів на клітинному рівні.

Дослідження взаємодії амінокислот з повільними електронами проводилося на модернізованому магнітному мас-спектрометрі МІ 1201 відділу електронних процесів і елементарних взаємодій ІЕФ НАН України. Дана експериментальна установка дає можливості для дослідження біяпорогових енергетичних залежностей ефективності іонізації і фрагментації складних органічних сполук (у тому числі і біомолекул) [2]. Мас-спектри дозволяють отримати інформацію щодо ідентифікації спостережуваних піків, визначення їх хімічного складу, а також запропонувати канали дисоціації, які призводять до появи основних іонів [3].

Нами були отримані мас-спектри молекул амінокислот лейцину та ізолейцину ($C_6H_{13}NO_2$), які мають однаковий атомарний склад і відрізняються будовою бічного радикала, ідентифіковано основні продукти розпаду вказаних молекул під дією електронів малих (до 100 еВ) енергій та встановлено їх хімічний склад. Зроблено аналіз впливу структури бічного радикала молекул лейцину та ізолейцину на перебіг дисоціації молекулярного іона.

[1] L. Sanche, Eur. Phys. J. D 35, 367 (2005).

[2] V.S. Vukstich, A.I. Imre, A.V. Snegursky, Instrum. Exper. Tech. 54, 207 (2011).

[3] C.G. Herbert, R.A.W. Johnstone, Mass Spectrometry Basics (CRC Press LLC, Boca Raton, Florida, 2003).

ВЕЛИКОМАСШТАБНІ СТРУКТУРИ ВСЕСВІТУ: СПОСТЕРЕЖНІ ДАНІ, МАТЕМАТИЧНІ ТА ІТ-МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

І.Б. Вавилова

*Головна астрономічна обсерваторія НАН України, Київ, Україна
e-mail: irivav@mao.kiev.ua*

Великомасштабна структура (ВМС) Всесвіту є веб-мережею, що складається з достатньо щільних пластів, розділених областями – войдами, в яких практично відсутня видима матерія (див. рис. 1 з роботи [1]). Формування та еволюція такої мережі ієрархічних структур Всесвіту тісно пов'язано з природою темної матерії, що домінує у масі Всесвіту (за даними WMAP частка речовини в енергетичному еквіваленті становить ~30 %, де темної матерії ~25 %, видимої ~5 %).

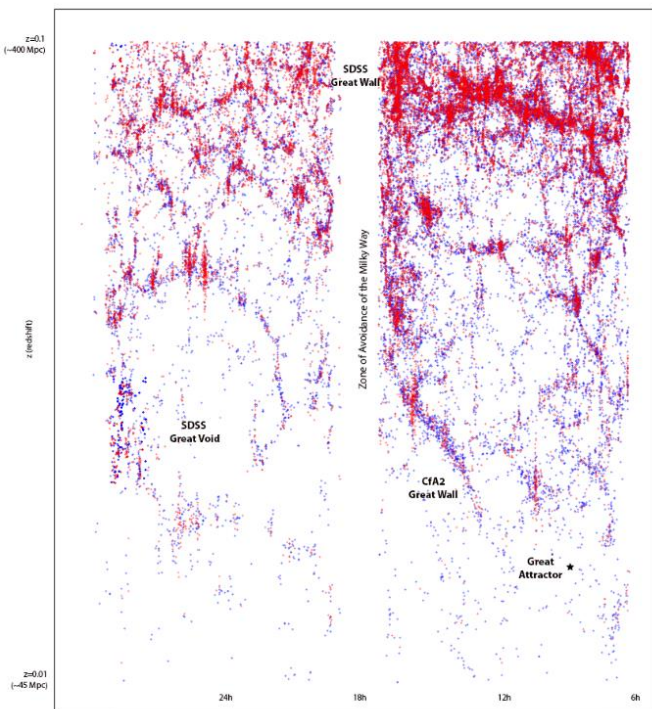


Рис. 1. Розподіл 48651 галактик з огляду SDSS DR9 на червоних зміщеннях $0,02 < z < 0,1$ (зона схилень $\delta = \pm 5^\circ$) як ілюстрація комірчасті ВМС Всесвіту: червоний колір – еліптичні і лінзоподібні галактики (E-S0a, N=24916), блакитний – спіральні та іррегулярні галактики (Sa-Irr, N=23735). Показано декілька ВМС структур: SDSS Great Wall, SDSS voids, CfA2 Great Wall, Great Attractor та Zone of Avoidance (Зона уникання нашої Галактики) [1]. (1 пк = 3,26 св. р. = 30,86 трлн км, $z = 0,1 \approx 400$ мпк)

Комірки мережі ВМС Всесвіту представлені галактиками і їхніми скупченнями та надскупченнями, які концентруються у вигнутих стінках товщиною порядку 10 млн св. р., що перетинаються одна з одною. Окремі стінки простежуються на сотні млн світлових років. Одним із прикладів пластів є Велика Стіна (CfA2 Greet Wall) розміром близько 500 млн св. р. і товщиною 15 млн св. р., яка знаходиться на відстані 200 млн св. р., а найбільш величезною є Велика Стіна Слоун (SDSS Great Wall) довжиною 1,37 млрд св. р. У вузлах перетину стінок знаходяться надскупчення галактик, у той час як у внутрішніх частинах комірок (войдах) щільність галактик вдсятеро менше за середню. На відстанях понад 300 Мпк (3 % від розміру Метагалактики, ~1 млрд св. р.) ВМС Всесвіту стає поступово

однорідною і ізотропною. Частину ВМС Всесвіту залишається невидимою для земного спостерігача, оскільки вона закрита поглинанням Молочного Шляху (Zone of Avoidance, Зона уникання).

Дослідження розподілу галактик у ВМС Всесвіту, внеску і складників темної матерії в окремих її структурах, аналіз фізичних процесів, що відбуваються у видимих структурах потребують новітніх підходів, заснованих на математичних методах, чисельних моделюваннях, ІТ-розробках і програмних забезпеченнях для візуалізації і обробки величезних баз даних, що накопичилися в архівах спостережень наземними і космічними телескопами про багато-хвильові властивості галактик, скупчень галактик, міжгалактичне середовище.

У доповіді будуть висвітлені методи і результати досліджень з акцентом на ті, які використовуються у відділі позагалактичної астрономії та астроінформатики ГАО НАН України за участі молодих вчених. Серед таких: метод мозаїки Вороного вищих порядків для пошуку малонаселених груп галактик і вмісту темної матерії в них [2], метод Лагранжа-Зельдовича для пошуку й опису структури войдів [3], метод композитних спектрів Лайман-лісу для досліджень міжгалактичного середовища [4], методи дослідження галактик з активними ядрами і процесів, що відбуваються в системі «акреційний диск – надмасивна чорна діра» [5, 6], методи машинного навчання для відтворення відстаней до галактик [7] і класифікації галактик за фотометричними параметрами [8] та їхніми зображеннями [9], а також окремі широковживані ПЗ (зокрема Illustris) для моделювання еволюції великомасштабних структур Всесвіту.

- [1] I. Vavilova, D. Dobrycheva, M. Vasylenko et al. Multiwavelength extragalactic surveys: examples of data-mining (Elsevier, 2020) ISBN 978-0-128-19154-5.
- [2] I. Vavilova, A. Elyiv, D. Dobrycheva, O. Melnyk. The Voronoi tessellation method in astronomy (Springer, Cham, 2021) ISBN 978-3-030-65867-0
- [3] A. Elyiv, M. Federico, G. Pollina et al. MNRAS, 448, 1, p. 642–653 (2015).
- [4] O. Torbaniuk, A. Ivashchenko. Kinem. Phys. Cel. Bodies, 33, p. 184–190 (2017).
- [5] Iu. Babyk, B.R. McNamara, P.E.J. Nulsen et al. ApJ, 862, article id. 39 (2018).
- [6] N. Pulatova, I. Vavilova, U. Sawangwit et al. MNRAS, 447, p.2209–2223 (2015).
- [7] A. Elyiv, O. Melnyk, I. Vavilova et al. Astron. Astrophys., 635, article id. A124 (2020).
- [8] I.B. Vavilova, D.V. Dobrycheva, M.Yu. Vasylenko et al. Astron. Astrophys., 648, article id. A122 (2021).
- [9] V. Khramtsov, I.B. Vavilova, D.V. Dobrycheva et al. Space Science & Technol., 28, 5, p. 27–55 (2022).

АЛЬТЕРНАТИВНА МІКРОЕНЕРГЕТИКА

О. Молнар

*Ужгородський національний університет, кафедра фізики напівпровідників,
Ужгород*

e-mail: alexander.molnar@uzhnu.edu.ua

Проблеми, пов'язані з загальним потеплінням, створили світову потребу в розробці та виготовленні сучасних електронних компонент з мікро потужним енергоспоживанням та альтернативних систем живлення для них, які працюють на основі відновлювальних джерел енергії. Коли мова йде про альтернативну енергетику, ми згадуємо вітряну, сонячну або гідроенергетику (потужністю сотні мегават), однак для живлення сучасних мобільних пристроїв, побутових або промислових інтернет речей або навіть людських імплантів необхідно створювати джерела живлення з вихідною напругою на рівні одиниць вольт та струмом у діапазоні від сотень наноампер до десятків мікроампер. Для цього можуть бути використані як відомі фізичні ефекти – на основі електромагнітної індукції, п'єзоелектричного-, фотоелектричного-, або піроелектричного ефектів, так і нестандартні джерела живлення на основі радіохвильових, трибоелектричних, біоелектричних або біохімічних перетворювачів. Вони хоча і давно відомі, однак лише зараз з'явилася можливість та необхідність їхнього практичного використання. Більшість подібних систем живлення використовують лише один з перерахованих ефектів або явищ, що суттєво обмежують їхнє використання, однак існують матеріали, здатні одночасно перетворювати різні види енергії в електричний струм.

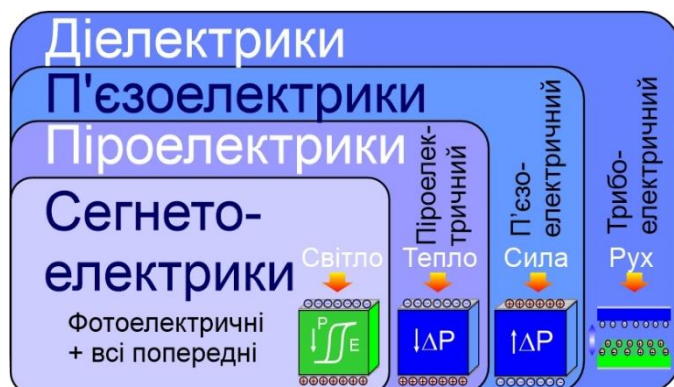


Рис. 1. Взаємозв'язок між різними матеріалами та фізичні ефекти, які можуть бути використані як джерела живлення.

Одним з найперспективніших матеріалів альтернативної мікроенергетики є сегнетоелектрики. Як показано на рис. 1. вони можуть перетворювати механічний рух (лінійний, циклічний або коливний) в електричний струм завдяки трибоелектричному ефекту, деформації, стисненню або розтягуванню, за рахунок п'єзоелектричного ефекту, зміни або коливання температури за рахунок піроелектричного ефекту, а також освітлення за рахунок фотоелектричного ефекту.

Нами розроблені альтернативні мікроперетворювачі на основі сегнетоелектриків різного типу 3D $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ та 2D CuInP_2S_6 , здатних використовувати всі раніше перелічені зовнішні впливи на електричний струм як нескінченне джерело енергії персональної системи телеметрії для співробітників служб порятунку.

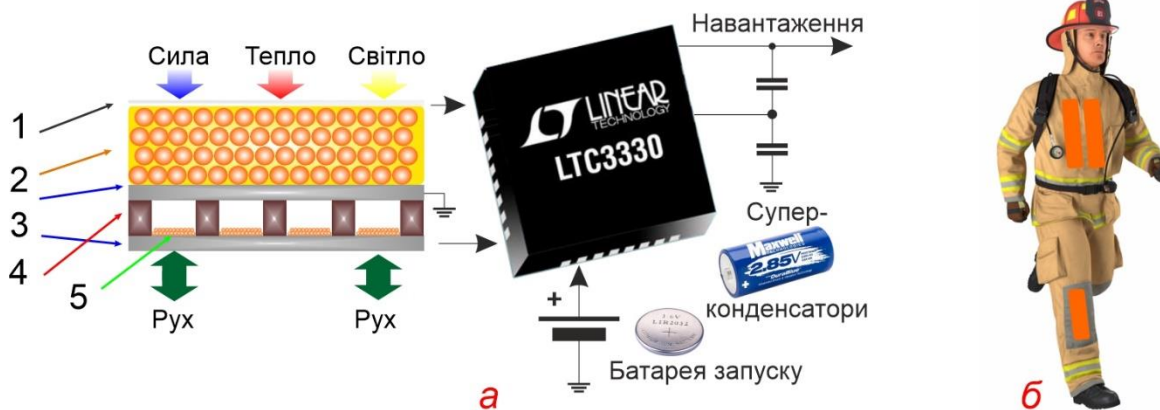


Рис. 2. Структурна-схема та підключення сегнетоелектричного перетворювача (а) та місце його розташування на тілі співробітника служби порятунку (б).

Конструкція запропонованого нами перетворювача дуже проста і показана на рисунку 2а. Активний монокристалічний шар 2 кристала CuInP_2S_6 розміщений між напівпрозорим електродом 1 (напилений тонкий шар оксиду олова) і основним електродом-носієм 3 з тонкого (1 мм) алюмінію. Ця сендвіч-структура, завдяки сегнетоелектричним властивостям активного матеріалу, перетворює деформацію або стиснення (завдяки п'єзоелектричному ефекту), освітлення (завдяки фотоелектричному ефекту) і зміну температури (завдяки піроелектричному ефекту) в електричний струм, причому одночасно.

Нижня частина перетворювача, що складається з алюмінієвих електродів 3, гнучких гумових ізоляторів 4 та активної речовини (порошку $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$) 5, залишилася практично незмінною [1], за винятком форми електродів 3, які завдяки 3D-архітектурі змогли використовувати рух не тільки у вертикальному, а й у горизонтальному напрямку. Ця частина перетворювача використовує трибоелектричний [2] та п'єзоелектричний [3] ефекти для перетворення руху або вібрації в електричний струм. Перетворювач може бути закріплений на одязі пожежника для живлення мобільної системи персональної телеметрії [4, 5].

- [1] A. Molnar, D. Gal, H. Ban, V. Gerasimov, Integrated Ferroelectrics 220, 110 (2021).
- [2] O. Molnar, V. Gerasimov, I.P. Kurytnik, Przegląd Elektrotechniczny 1, 167 (2018).
- [3] А.А. Молнар, И.П. Куритник, В.В. Герасимов, Д.Ж. Карабекова, Вестник карагандинского университета, Серия Физика 4(80), 62 (2015).
- [4] A. Molnar, V. Gerasimov, I.P. Kurytnik, Pomiarы Automatyka Robotyka 20, 11 (2016).
- [5] О.О. Молнар, Г.Й. Бан, Д.Л. Гал, В.В. Герасимов, Комп'ютерно-інтегровані технології 30-31, 244 (2018).

ОКСИДНО-КЕРАМІЧНІ ПОКРИТТЯ НА ТИТАНІ І ЙОГО СПЛАВАХ БІОМЕДИЧНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ

О. Калініченко

*Державний вищий навчальний заклад Український державний
хіміко-технологічний університет, Дніпро, Україна
e-mail: kalinichenkooleg1@gmail.com*

Дана робота направлена на дослідження умов отримання біомедичних покриттів, їх властивостей та способів використання. Внаслідок російського повномасштабного вторгнення в Україну значна кількість військовослужбовців та цивільних отримали поранення. Галузь українських імплантатів потребує нових технологій обробки поверхні для покращення їх властивостей та підвищення рівня якості надання таких необхідних медичних послуг.

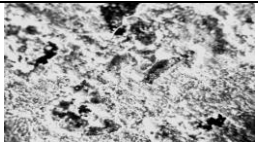
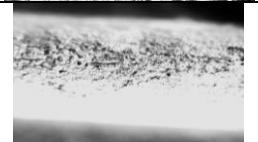
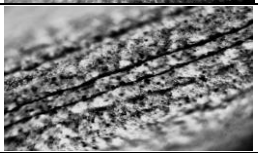
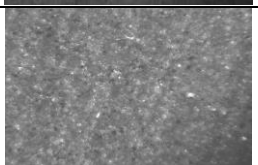
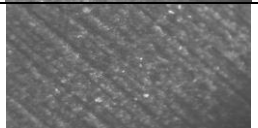
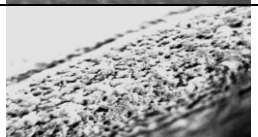
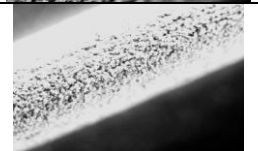
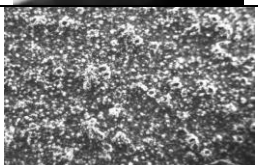
На різних етапах досліджень перевага віддавалася біологічно інертним, тобто не токсичним і стійким до біохімічних впливів організму людини матеріалам: корозійно-стійким металам (титану і його сплавам, нержавіючій сталі та ін.), кераміці (корундовій, диоксидцирконієвій та ін.) і пластмасам (поліметилметакрилату, високомолекулярному поліетилену). Однак біоінертні матеріали знайшли лише обмежене застосування в реконструктивно-відновлювальній хірургії через неминучі реакції відторгнення [1]. Здатність імплантату до інтеграції з кістковою тканиною може бути досягнута нанесенням біоактивних покриттів – тобто симбіозу металу (основа) і кераміки (покриття). Для нанесення таких покриттів було обрано метод плазмово-електролітичного оксидування (ПЕО).

Покриття отримували на сплавах титану ВТ6 (склад в мас. %: $Fe \leq 0,6$; $C \leq 0,1$; $Si \leq 0,1$; $V = 3,5 \div 5,3$; $N \leq 0,05$; $Al = 5,3 \div 6,8$; $Z \leq 0,3$; $O \leq 0,2$; $H \leq 0,015$), Ti-6Al-4V (склад в мас. %: $Al = 5,5 \div 6,75$; $V = 3,5 \div 4,5$; $N = 0,05$; $C = 0,08$; $Fe = 0,3$; $H = 0,015$; $O = 0,2$), Ti-13Nb-13Zr (склад в мас. %: $Nb = 12,5 \div 14,0$; $Zr = 12,5 \div 14,0$; $Fe < 0,25$; $C < 0,08$; $N < 0,05$; $O < 0,15$; $H < 0,015$), Ti Grade 4 (склад у мас. %: $Fe \leq 0,5$; $C \leq 0,08$; $O \leq 0,4$; $N < 0,05$; $O < 0,15$; $H < 0,015$) на експериментальній установці плазмово-електролітичного оксидування з позитивною і негативною складовою по струму при різних частотах, тривалості процесу та у різних розчинах. Як електроліт використовували водні розчини солей Ca і P різних складів і концентрацій.

Після отримання вимірювали товщину та отримували SEM зображення покриттів. Результати наведено у таблиці 1.

Зразок №1, одержаний при високому струмі і низькій частоті, має нерівномірне тонке покриття, непридатне для використання. Однак зразок №2, отриманий в тому ж електроліті в іншому режимі, має рівне однорідне покриття гарної якості. Зразки №2-10, які нанесені на сплави металів різної форми, мають рівномірне покриття товщиною 16-70 мкм та можуть використовуватися для подальших випробувань.

Таблиця 1. Умови нанесення покриттів та результати їх досліджень.

№	Сплав	Електроліт №, вміст	Сила струму, анод / катод, А	Частота, Гц	Тривалість, хв	Товщина, мкм	SEM
1	Ti Grade 4	№1 $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$	3/1	50	5	5,2	
2	Ti BT-6	№1 $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$	0,3/0,2	100	5	48	
3	Ti Grade 4	№2 $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ $*x\text{H}_2\text{O}$	0,5/0,5	300	5	17,48	
4	Ti BT-6	№2 $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ $*x\text{H}_2\text{O}$	1/0,5	300	5	22	
5	Ti-15Mo	№2 $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ $*x\text{H}_2\text{O}$	1/0,5	300	5	19,98	
6	Ti-13Zr-13Nb	№2 $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ $*x\text{H}_2\text{O}$	3/1,5	300	5	16,42	
7	Ti-13Zr-13Nb	№3 $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ NaOH	2/1,9	300	5	19,48	
8	Ti BT-6	№3 $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ NaOH	0,5/0,2	300	5	23	
9	Ti BT-6	№4 $\text{Na}_6\text{P}_6\text{O}_{18}$ $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ $*x\text{H}_2\text{O}$	0,9/0,6	300	5	70	
10	Ti-13Zr-13Nb	№4 $\text{Na}_6\text{P}_6\text{O}_{18}$ $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ $*x\text{H}_2\text{O}$	2/1	300	10	58,6	

[1] Л.О. Сніжко, О.Б. Гірін, В.О. Головенко, О.О. Калініченко, К.В. Роєнко, Плазмово-електролітичний синтез біосумісних покриттів на сплавах титану і магнію (ДВНЗ УДХТУ, Дніпро, 2019).

ВПЛИВ ЕНЕРГІЇ ЗБУДЖЕННЯ НА ФОРМУВАННЯ ФРАГМЕНТІВ ФОТОПОДІЛУ ^{238}U ДЛЯ ПЕРШОГО ШАНСУ

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

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: zheka.net.ua@gmail.com

Виходи фрагментів – один із основних параметрів, який характеризує процес фотоподілу актинідів, викликає як фундаментальний, так і практичний інтерес [1,2]. У зв'язку з цим існує постійна потреба у розробці та використанні надійних методів визначення параметрів цього процесу, який відбувається при взаємодії фотонів з актинідами, а також у проведенні систематичних і максимально точних розрахунків його характеристик.

Фотони при взаємодії з актинідами привносять відносно малі зміни у збудження порівняно з зарядженими частинками, що дозволяє отримувати подільні ядра з малою енергією збудження безпосередньо після їх поглинання. Тобто це дозволяє вивчати процес фотоподілу для області енергій першого шансу (до емісії перед-подільних). Це спрощує інтерпретацію отриманих результатів та дозволяє робити практично однозначні висновки про роль досліджуваних ефектів.

Особливий інтерес у плані експериментальних і теоретичних досліджень становить інформація про виходи фрагментів фотоподілу ядра ^{238}U завдяки їх використанню для вирішення широкого кола прикладних задач [2].

Метою запропонованої роботи є дослідження впливу енергії збудження на формування фрагментів фотоподілу ^{238}U в області енергій першого шансу.

Для реалізації поставленої задачі необхідно було:

- розрахувати границі області енергій першого шансу поділу (тобто порогові значення енергій (γ, f) - та (γ, nf) - реакцій);
- провести симуляції залежності масових, елементних та ізотонних розподілів фрагментів фотоподілу ^{238}U від енергії збудження;
- проаналізувати імовірність утворення каналів поділу (симетричного – SL, двох асиметричних – SI, SII і супер асиметричного – SA) та їх впливу на формування фрагментів фотоподілу ^{238}U .

Комп'ютерні розрахунки проводилися кодами Монте Карло – GEF і TALYS [3,4].

У представленій роботі отримані наступні результати:

- Визначено границі області енергій фотоподілу ^{238}U без попередньої емісії нейтронів ~ 4.3 та 10.8 MeV. Результати розрахунків проведені з використанням кодів GEF і TALYS узгоджуються між собою.
- Розраховано залежності виходів фрагментів (до та після емісії миттєвих нейтронів) від їх маси, заряду та кількості нейтронів (масові, елементарні, ізотонні розподіли) для подільного ядра $^{238}\text{U}^*$ в області енергій першого шансу. Встановлено, що форми отриманих спектрів у цілому відображають структуру розподілів виходів уламків, притаманну для існуючих оцінених експериментальних даних фотоподілу актинідів [5,6], і суттєво залежать від енергії збудження

подільного ядра. Це підтверджує результат додатково проведених розрахунків для спонтанного поділу ^{238}U . З ростом енергії збудження структура масових, елементарних та ізотонних розподілів фрагментів “згладжується” (Рис. 1).

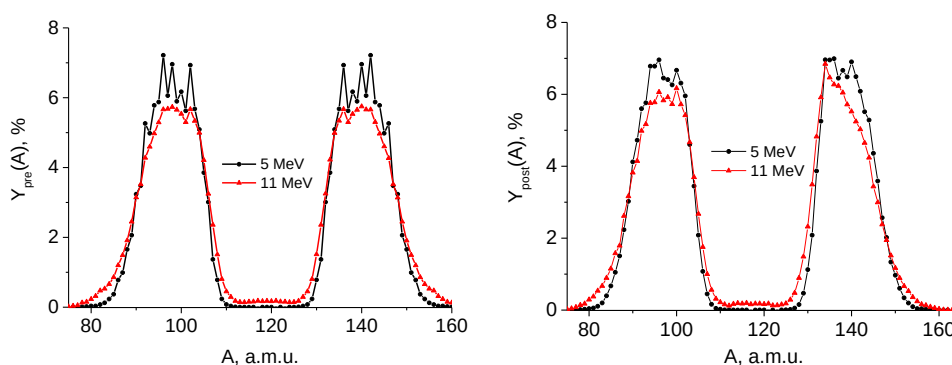


Рис. 1. Спектри пре- (зліва) та пост-нейтронних (справа) фрагментів фотоподілу ^{238}U при енергіях фотонів 5 (кружечки) і 11 MeV (трикутники).

- Встановлено залежності імовірності внеску окремих каналів поділу на формування масових спектрів фрагментів для подільного ядра $^{238}\text{U}^*$ від енергії збудження. Їх значення становлять для $Y_{\text{SL}} = 0.009 \div 1.68 \%$, $Y_{\text{SI}} = 18.19 \div 15.67 \%$, $Y_{\text{SII}} = 81.65 \div 81.04 \%$, $Y_{\text{SA}} = 0.1435 \div 1.611 \%$. Імовірності внеску каналів SL, SA суттєво зростають при спаді внеску каналу SII при стабільності внеску каналу SII з ростом E^* . Основний внесок у формування уламків фотоподілу ^{238}U в області енергій першого шансу вносять асиметричні канали SI і SII. Відповідно до розрахунків типу Струтинського (Strutinsky) асиметричний канал поділу SI зумовлений замкненими сферичними оболонками у $Z = 50$ і $N = 82$, а канал SII, пов'язаний з оболонкою біля $N = 88$.

Результати проведених симуляцій узгоджуються з результатами розрахунків виконаних у рамках мульти-гаусової моделі для області енергій гігантського дипольного резонансу [7].

Отримані числові значення масових, елементарних та ізотонних розподілів фрагментів фотоподілу ^{238}U для області енергії першого шансу можуть бути використані для розвитку і тестування існуючих та нових модельних підходів для описання фотоподілу актинідів, а також для прикладних застосувань ізотопного і кількісного аналізу ядерних матеріалів та трансмутації відпрацьованого ядерного палива.

- [1] K.-H. Schmidt et al. Rep. Prog. Phys. 81, 106301 (2018).
- [2] A. Zilges et al. Progress in Particle and Nuclear Physics 122, 103903 (2022).
- [3] GEF 2023/2.1. <http://www.khschmidts-nuclear-web.eu/GEF-2023-2-1.html>
- [4] TALYS-1.96. Release date: December 30, 2021.
https://tendl.web.psi.ch/tendl_2021/talys.html
- [5] Experimental Nuclear Reaction Data (EXFOR). Database Version of 2023-01-20.
<https://www-nds.iaea.org/exfor/>
- [6] Evaluated Nuclear Data File (ENDF). Database Version of 2022-04-20.
<https://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm>
- [7] D. Bhowmick et al. Canadian Journal of Physics 94, 243 (2015).

FEW-PHOTON WAVE PACKET PROPAGATION VIA A COMPOSITE QUANTUM EMITTER IN A ONE-DIMENSIONAL WAVEGUIDE

V. L. Andriichuk¹, E. V. Stolyarov²

¹*Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine,
Kyiv, Ukraine*

²*Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, National Academy of Sciences of Ukraine,
Kyiv, Ukraine*

e-mail: valentyn.andriichuk@gmail.com

Quantum information transfer between stationary qubits using photons is an advanced approach to quantum information technologies [1]. Single photons propagating through one-dimensional (1D) waveguide structures act as transmitters of quantum states which encode quantum information between remote stationary qubits [2]. These structures can serve as reliable, long-range, and low-loss quantum channels for the transmission of itinerant photons. In addition, strong coupling between a stationary qubit and a guided electromagnetic mode gives rise to enhanced photon-qubit interaction, providing an efficient coherent exchange of quantum states. The study of light-matter interactions has advanced significantly with the development of circuit quantum electrodynamics [3], which enables the study of single- and few-photon propagation in 1D transmission lines in solid-state systems.

In the report, we study the propagation of few-photon pulses in a 1D waveguide coupled to a composite quantum emitter – a photonic dimer composed of two coupled resonators. In our model, we assume that the resonators contain Josephson junctions giving rise to self-Kerr nonlinearity. The nonlinear resonators interact via coherent single-photon exchange and cross-Kerr coupling. The latter can result in two-mode entanglement [4].

For studying the evolution of a photonic wave packet propagating in a waveguide-emitter system, we employ a wave-function approach developed in [5]. We derive and solve (analytically and numerically) a set of equations of motion governing the evolution of the quantum state for the cases of single- and two-photon Fock-state pulses incident on the quantum emitter. This approach allows us to analyze the evolution of the wave packet and the quantum emitter during their interaction. We study the dependence of the scattered photons' characteristics on the parameters of the emitter and the incident pulse.

- [1] T. E. Northup and R. Blatt, Nat. Photonics 8, 356 (2014).
- [2] D. N. Matsukevich, T. Chanelière, S. D. Jenkins, S.-Y. Lan, T. A. B. Kennedy, and A. Kuzmich, Phys. Rev. Lett. 96, 030405 (2006).
- [3] A. Blais, A. L. Grimsmo, S. M. Girvin, and A. Wallraff, Rev. Mod. Phys. 93, 025005 (2021).
- [4] M. Elliott, J. Joo, and E. Ginossar, New J. Phys. 20, 023037 (2018).
- [5] E. V. Stolyarov, Phys. Rev. A 99, 023857 (2019).

ЧАС ПЕРЕДАЧІ КВАНТОВОЇ ІНФОРМАЦІЇ ВІД ОДНОГО АТОМА-КУБІТА ДО ІНШОГО З УРАХУВАННЯМ ЗАТУХАННЯ КВАНТОВИХ СТАНІВ

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

ДВНЗ "Ужгородський національний університет", Ужгород
e-mail: kuzma.svitlana@uzhnu.edu.ua

У зв'язку з бурхливим розвитком квантової оптики останнім часом усе більший інтерес викликають багаточастинкові задачі, що описують системи кубітів, керовані зовнішніми полями [1]. Існує безліч різних квантових систем, що моделюють кубіти – носії одиниці квантової інформації [1, 2]. Одним з можливих варіантів є використання в цій якості дворівневих атомів. Зазвичай зв'язок атомів у задачах квантової оптики і квантової інформатики здійснюється за допомогою запізнюючої взаємодії атомів між собою, а когерентний контроль системи здійснюється за рахунок їх взаємодії з полем реальних фотонів.

В подальшому нами використовується концепція складного ("компаунд") об'єкта, а саме "атом $A(1)$ + атом $A(2)$ + поле F ". У відповідності з цією концепцією при аналізі процесів передачі квантової інформації між кубітами $A(1)$ та $A(2)$ зручно розглядати поле як систему з визначеним числом квантів n_ω і включати його у незбурений гамільтоніан $\hat{H}$. Повний гамільтоніан $\hat{H}$ компаунд-системи " $A(1) + A(2) + F$ " має вигляд:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int} = \hat{H} + \hat{H}_F + \hat{H}_{int}. \quad (1)$$

Тут $\hat{H}_0 = \hat{H} + \hat{H}_F = \hat{H}_1(\vec{r}_1) + \hat{H}_2(\vec{r}_2) + \hat{V}_{дип}^{(\pm)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R) + \hat{H}_F$, $\hat{H}_1$, $\hat{H}_2$ – гамільтоніани ізолюваних атомів $A(1)$ і $A(2)$ відповідно; $\vec{R}$ – вектор відстані між ядрами атомів; $\hat{V}_{дип}^{(\pm)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R)$ – оператор взаємодії атомів $A(1)$ і $A(2)$ на довільній відстані один від одного в електричному дипольному наближенні (див. [3]); радіус-вектори електронів $\vec{r}_1$ і $\vec{r}_2$ відносяться до першого $A(1)$ і другого $A(2)$ атома відповідно.

Динаміку симетричного $\tilde{\Psi}_m^{(0)} \rightarrow \tilde{\Psi}_s^{(0)}$ і антисиметричного $\tilde{\Psi}_n^{(0)} \rightarrow \tilde{\Psi}_a^{(0)}$ каналів взаємодії пари атомів з полем реальних фотонів можна розглядати окремо один від одного. У випадку симетричного каналу $\tilde{\Psi}_m^{(0)} \rightarrow \tilde{\Psi}_s^{(0)}$ для амплітуд станів $a_m(t)$ і $a_n(t)$ (тобто коефіцієнтів при базисних функціях $\tilde{\Psi}_m^{(0)}$ і $\tilde{\Psi}_s^{(0)}$) з нестационарного рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1) отримаємо звичним чином наступну систему диференціальних рівнянь:

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \frac{da_m}{dt_1} &= F_{mn} \exp[i(\omega_{mn} + \omega + i\gamma_n)t_1] a_n = F_{mn} \exp(i(\varepsilon_+ + i\gamma_n)t_1) a_n, \\ i\hbar \frac{da_n}{dt_1} &= F_{nm} \exp(-i(\varepsilon_+ + i\gamma_n)t_1) a_m, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

де $\varepsilon_+ = (\delta E_s - \hbar\Delta)/\hbar$, $\gamma_n = \Gamma_n/2$, $\Gamma_n = \Gamma_{s(a)} = \gamma_0 + \gamma_{s(a)}$ – константи затухання симетричного (антисиметричного) стану, F_{nm} – матричний елемент переходу $\tilde{\Psi}_m^{(0)} \rightarrow \tilde{\Psi}_s^{(0)}$.

Врахування затухання ($\gamma_n \neq 0$) призводить до появи уявних частин у частотах $\omega^{(1,2)}$ і, тим самим, до затухання амплітуд колективних станів $\tilde{\Psi}_m^{(0)}$ і $\tilde{\Psi}_n^{(0)}$. Кінцевий результат для амплітуд a_m і $\tilde{a}_n$ у випадку періодичного за часом збурення:

$$a_m = \exp\left(-\frac{\gamma_n - i\varepsilon_+}{2} t_1\right) \left\{ \cos((\Omega_+ + i\beta_+)t_1) - \frac{i(\varepsilon_+ + i\gamma_n)}{2(\Omega_+ + i\beta_+)} \sin((\Omega_+ + i\beta_+)t_1) \right\},$$

$$\tilde{a}_n = a_n e^{-\gamma_n t_1} = -\frac{iF_{nm}}{(\Omega_+ + i\beta_+)\hbar} \exp\left(-\frac{\gamma_n + i\varepsilon_+}{2} t_1\right) \sin((\Omega_+ + i\beta_+)t_1). \quad (3)$$

Тут Ω_+ і β_+ – дійсні числа, що визначаються співвідношенням:

$$\Omega_+ + i\beta_+ = \left\{ \frac{|F_{nm}|^2}{\hbar^2} + \frac{(\varepsilon_+ + i\gamma_n)^2}{4} \right\}^{1/2}.$$

Розв'язок (3) для симетричного (антисиметричного) каналу взаємодії складним чином залежить від трьох параметрів: ε_+ , F_{nm} , $\gamma_n = \Gamma_s/2$ і часу t_1 . Загальний характер залежності $|a_m(t_1)|^2$ і $|\tilde{a}_n(t_1)|^2$ від часу має вигляд

$$\exp(-\gamma_n t_1) (A \exp(-\beta_+ t_1) + B \exp(-i\Omega_+ t_1) + C \exp(\beta_+ t_1)),$$

де сталі A , B , C визначаються параметрами ε_+ , F_{nm} , Γ_s .

Для будь-яких співвідношень між Γ_s , β_+ , Ω_+ є початкова стадія процесу, коли $t_1 \ll \Gamma_s^{-1}$, β_+^{-1} , Ω_+^{-1} . Якщо ж $\Gamma_s \gg \Gamma_s - \beta_+$, $\Gamma_s^{-1} \ll t_1 \ll (\Gamma_s - \beta_+)^{-1}$, то реалізується квазістаціонарний режим, який у реальній ситуації відповідає достатньо великим часам ($\Gamma_s t_1 \gg 1$) спостереження за компаунд-системою. У цьому випадку затухання станів нетривіальним чином впливає на часовий хід амплітуд ймовірностей $a_m(t_1)$ та $\tilde{a}_n(t_1)$; ефект затухання тим більший, чим більшою є константа затухання Γ_s і чим меншим відношення $(\Gamma_s - \beta_+)/\Gamma_s$.

Як видно з розв'язку (3) системи (2), врахування затухання одного з рівнів призводить до «перекидання» цього затухання на інший рівень. Наприклад, якщо в початковий момент часу ($t_1 = 0$) стан $\tilde{\Psi}_m^{(0)}$ був стабільним, то в наступні моменти часу ($t_1 > 0$) він може розпадатися з константою, рівною половині константи затухання стану $\tilde{\Psi}_n^{(0)}$. Виявлений ефект втрати когерентності квантових станів перешкоджає квантовим обчисленням і тому повинен бути вкрай мінімізований. У зв'язку з цим найбільш перспективним як кубіти квантового комп'ютера бачиться використання ультрахолодних електронейтральних атомів у високоезбуджених станах з головним квантовим числом набагато більшим за одиницю.

- [1] K.A. Valiev, Phys. Usp. 48, 1 (2005).
- [2] V.Yu. Lazur, S.I. Myhalyna, O.K. Reity, Phys. Rev. A. 81, 062707 (2010).
- [3] 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).

ФОТОВОЛЬТАЇЧНА КОМІРКА НА ОСНОВІ *n*-ZnO МІКРОСТРИЖНІВ ТА *p*-GaN ПЛІВКИ

В. Васильєв¹, Б. Турко¹, Б. Садовий^{1,2}, Ю. Еліяшевський¹, Р. Серкіз¹

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів

²Інститут фізики високих тисків ПАН, Варшава

e-mail: Vladyslav.Vasilyev@lnu.edu.ua

Фотовольтаїчні комірки зазвичай розробляють та виготовляють для перетворення енергії сонячного випромінювання у видимому діапазоні довжин хвиль світла в електричну, бо на хвилі видимого діапазону (400–760 нм) припадає найбільша частка енергії сонячного випромінювання (приблизно 50 %). На ультрафіолетовий діапазон довжин хвиль світла припадає лише 7 % енергії сонячного випромінювання. Однак, виготовлені для роботи в ультрафіолетовому діапазоні довжин хвиль світла фотовольтаїчні комірки будуть оптично прозорими. І зможуть, наприклад, використовуватися як віконне чи автомобільне скло, захищаючи організм людини від шкідливої дії ультрафіолетового опромінення [1].

Про світлодіоди, фотодетектори та лазери на основі гетероструктур ZnO/GaN широко відомо [1–3] та є мало повідомлень про фотовольтаїчні комірки на основі ZnO/GaN [1, 4]. Описані в [1, 4] фотовольтаїчні комірки були виготовлені на основі епітаксійних плівок *p*-GaN і плівок ZnO, вирощених методом молекулярно-променевої епітаксії [1] або отриманих методом високочастотного магнетронного розпилення [4].

Для створення фотовольтаїчної комірки було використано комерційну підкладку GaN *p*-типу, придбану у фірми «UNIPRESS» з Польщі (плівка GaN (0001), легована магнієм, товщиною 2 мкм, вирощена методом металоорганічної парофазної епітаксії (MOVPE) на сапфіровій підкладці товщиною 430 мкм, вкритій непровідним буферним шаром GaN товщиною 1,5 мкм). Відповідно до паспортних даних плівка *p*-GaN характеризувалася відносно низькою густиною дислокацій – $(3-5) \times 10^8 \text{ см}^{-2}$; концентрація домішки магнію становила $2 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$; концентрація електрично активних дірок була рівною $(2-3) \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Шар ZnO, який складався зі щільно упакованих вертикальних мікрострижнів діаметром приблизно 2–3 мкм, згідно з даними растрової електронної мікроскопії, було вирощено на підкладці *p*-GaN методом газотранспортних реакцій [3].

Для дослідження вольт-амперних та фотовольтаїчних характеристик контакт з плівкою *p*-GaN формували з бішару Ni (30 нм)/Au (35 нм) термічним вакуумним випаровуванням [2]. Товщину шарів моніторили кварцовим вимірювачем товщини плівок. При виготовленні фотоелектричного елемента масив мікроструктур ZnO частково покривався центрифугуванням ізоляційним шаром фоторезисту [4]. Після

цього поверх наносилася термічним вакуумним випаровуванням тонка плівка In як верхній електрод [5].

Вимірювання вольт-амперних характеристик здійснювали програмованим електрометром Keithley Model 6514 (Keithley Instruments Inc., Огайо, США).

Коефіцієнт випрямлення (відношення прямого струму до зворотного) гетеропереходу $n\text{-ZnO}/p\text{-GaN}$ дорівнював 170 при напрузі 1 В. Напряга увімкнення гетеропереходу у нашому випадку приблизно дорівнювала 0,6 В. Фактор ідеальності діода η виявився приблизно рівним 4. Великі значення фактора ідеальності діода вказують на високу густину пасток [2]. Доволі велике відхилення η від ідеального випадку ($\eta = 1$) може бути пов'язаним з якістю контактів до $p\text{-n}$ -переходу [2]. Гетероструктура $\text{In}/\text{ZnO}/\text{GaN}:\text{Mg}/\text{Ni}/\text{Au}$ продемонструвала чіткий фотовольтаїчний ефект при ультрафіолетовому світлодіодному освітленні з максимумом випромінювання на довжині хвилі 395 нм, півшириною смуги випромінювання 13 нм та з густиною потужності випромінювання 2 мВт/см². Фотовольтаїчна комірка $\text{In}/\text{ZnO}/\text{GaN}:\text{Mg}/\text{Ni}/\text{Au}$ мала наступні параметри: напруга холостого ходу – приблизно 0,26 В, струм короткого замикання – приблизно 0,124 нА, фактор заповнення – 39 %, коефіцієнт корисної дії – $1,4 \cdot 10^{-5}$ %.

На основі літературних даних [1, 4] і наших експериментальних результатів можна зробити висновок, що продуктивність виготовленого пристрою в основному обмежена дефектами на межі ZnO/GaN і частковим поглинанням світла шаром фоторезисту. За таких обставин продуктивність пристрою можна покращити зменшенням кількості інтерфейсних дефектів та заміною шару фоторезисту на прозорий для ультрафіолетового випромінювання шар діелектрика, наприклад на шар SiO_2 .

Наведені результати досліджень можуть стати в нагоді в інженерії електронних пристроїв на основі оптично прозорих матеріалів.

- [1] X. Yang, C.-X. Shan, Y.-J. Lu, X.-H. Xie, B.-H. Li, S.-P. Wang, M.-M. Jiang, D.-Z. Shen, Opt. Lett. 41, 685 (2016).
- [2] B. Turko, A. Nikolenko, B. Sadovyi, L. Toporovska, M. Rudko, V. Kapustianyk, V. Strelchuk, M. Panasyuk, R. Serkiz, P. Demchenko, Opt. Quantum Electron. 51, 135 (2019).
- [3] B.I. Turko, A.S. Nikolenko, B.S. Sadovyi, L.R. Toporovska, M.S. Rudko, V.B. Kapustianyk, V.V. Strelchuk, R.Y. Serkiz, Y.O. Kulyk, J. Phys. Sci. 25, 1701 (2021).
- [4] S.Y. Nam, Y.S. Choi, J.H. Lee, S.J. Park, J.Y. Lee, D.S. Lee, J. Nanosci. Nanotechnol. 13, 448 (2013).
- [5] М.Р. Панасюк, Д.Л. Вознюк, В.Б. Капустяник, Б.І. Турко, В.С. Цибульський, Г.О. Лубочкова, Ю.Г. Дубов, ФХТТ 1, 244 (2010).

ANOMALOUS LOW THERMAL CONDUCTIVITY OF ATOMICALLY THIN InSe PROBED BY SCANNING THERMAL MICROSCOPY

Z.R. Kudrynskyi,^{1,2,*} D. Buckley,³ N. Balakrishnan,^{4,5} T. Vincent,³ D. Mazumder,¹ E. Castanon,⁶ Z.D. Kovalyuk,² O. Kolosov,⁶ O. Kazakova,³ A. Tzalenchuk,³ and A. Patané¹

¹ School of Physics and Astronomy, University of Nottingham, Nottingham, UK

² Institute for Problems of Materials Science, NAS of Ukraine, Chernivtsi Branch, Chernivtsi, Ukraine

³ National Physical Laboratory, Teddington, UK

⁴ National Graphene Institute, The University of Manchester, Manchester, UK

⁵ School of Chemical and Physical Sciences, Keele University, Keele, UK

⁶ Department of Physics, Lancaster University, Lancaster, UK

*e-mail: zakhar.kudrynskyi@nottingham.ac.uk

The ability of a material to conduct heat influences many physical phenomena, ranging from thermal management in nanoscale devices to thermoelectrics. Van der Waals two dimensional (2D) materials offer a versatile platform to tailor heat transfer due to their high surface-to-volume ratio and mechanical flexibility. The science and technology of 2D InSe is a rapidly developing field [1-6]. However, the investigation of phonon transport and thermal properties of 2D InSe is still in its infancy. Although theoretical studies have provided an insight into the thermal conductivity (κ) of 2D InSe, the experimental investigation of heat transport at the nanoscale is rarer, as it requires advanced microscopy imaging techniques. Furthermore, real device structures involve heat transfer across interfaces and lateral boundaries that are generally ignored by theory. Phonon transport underpins a plethora of physical phenomena, ranging from heat conduction and thermal insulation to energy conversion. Thus, they play a key role in several emerging applications. For example, a low thermal conductivity represents a drawback to heat dissipation in miniaturized FETs, but is desirable for thermoelectric energy conversion.

Here, we use scanning thermal microscopy (SThM) to probe the thermal conductivity properties of InSe, a 2D semiconductor that has opened new promising directions in science and technology [5]. The imaging capability of scanning thermal microscopy and its high spatial resolution have enabled us to investigate how the surface topography of a 2D InSe flake and its supporting substrate influence the thermal response. Our investigation of 2D InSe flakes with different size and/or non-uniform topography and systems where the layers are supported by different substrates have revealed a low thermal conductance for 2D InSe, lower than in low- κ SiO₂. This anomalous finding contrasts with previous theoretical studies in the literature, where the role of the substrate was not taken into account. The ability of 2D InSe to conduct heat depends on the thermal interfacial resistance between InSe and the supporting substrate, number of layers, lateral size, and/or strain. It decreases with a decreasing number of layers ($L \leq 5$) and/or flake area ($A < 2 \mu\text{m}^2$). This behavior is consistent with earlier

theoretical studies of 2D InSe and is attributed to phonon-boundary surface scattering and to the modified phonon dispersions due to quantum confinement. Enhanced phonon scattering by impurities and/or strain can further influence the thermal conductivity, as discussed for layers transferred onto microwells and micropillars (Figure 1).

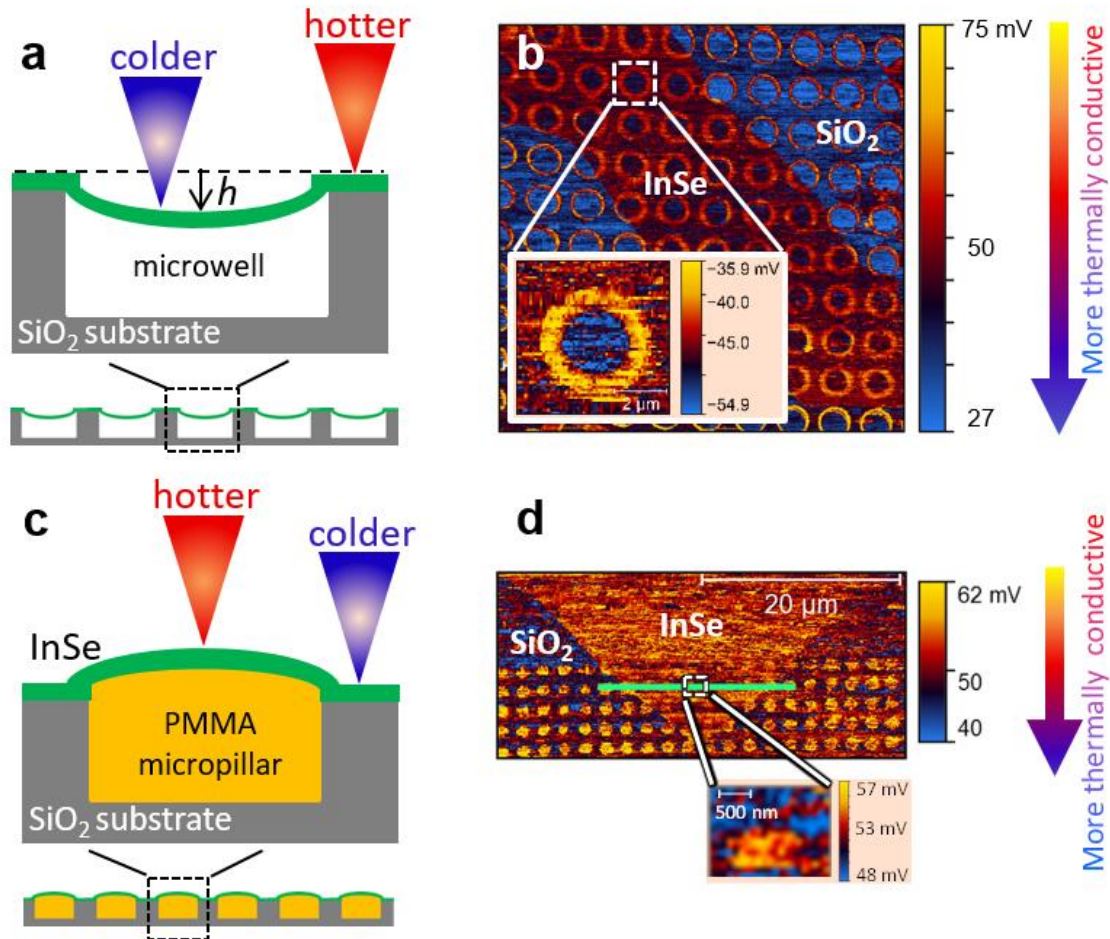


Fig. 1 Thermal properties of free-standing InSe (a, b) and PMMA-supported InSe (c, d). The schematics in parts (a, c) illustrate the heat conduction. SThM images are shown in parts (b, d).

These experimental findings reveal the complexity of thermal transport in 2D systems based on InSe and its importance for future emerging technologies, such as field effect transistors that require efficient heat dissipation and InSe-based thermoelectrics that can benefit from the exceptional combination of the unusually low- κ and high electron mobility (up to 0.2 V/m $\cdot$ s at 300 K) of this 2D material.

- [1] T. Venanzi et al., Appl. Phys. Lett. 9, 120 (2022).
- [2] Z.R. Kudrynskyi, et al., Commun. Phys. 3, 16 (2020).
- [3] Z.R. Kudrynskyi, et al., Phys. Rev. Lett. 119, 157701 (2017).
- [4] D.A. Bandurin, et al., Nature Nanotechnol. 12, 223 (2017).
- [5] D. Buckley, et al., Adv. Funct. Mater. 31, 2008967 (2021).
- [6] J. D. G. Greener, et al., ACS Nano 13, 11530 (2019).

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВИХОДІВ ПРОДУКТІВ ^{89}Rb і ^{138}Cs , УТВОРЕНИХ ПРИ АКТИВАЦІЇ ЯДЕРНИХ МАТЕРІАЛІВ НЕЙТРОНАМИ, ДЛЯ ІЗОТОПНОЇ ІДЕНТИФІКАЦІЇ

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

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

Важливою задачею атомної техніки є контроль за нерозповсюдженням фертильних та подільних (як правило це актиніди - ^{232}Th , ^{235}U , ^{238}U і ^{239}Pu) ядерних матеріалів при їх експлуатації, зберіганні та переміщенні [1]. Для успішної реалізації вказаної задачі необхідна надійна інформація про їх ізотопний склад.

Один із найбільш вживаних способів визначення ізотопного складу ядерних матеріалів базується на використанні експериментально отриманої інформації про співвідношення виходів стимульованого запізненого (затриманого) γ -випромінювання від легких та важких продуктів їх поділу, які, в свою чергу, залежать від природи активованих ядерних матеріалів. Як легкі та важкі продукти поділу – емітери запізненого γ -випромінювання - можуть використовуватися пари уламків ^{89}Rb та ^{138}Cs . Їх вибір обумовлений наявністю широкого набору інтенсивних γ -ліній у спектрах запізненого γ -випромінювання з енергією > 1000 кеВ, тобто в області енергій, де внеском у γ -спектри від характеристичного випромінювання досліджуваних ядерних матеріалів (актинідів) можна знехтувати [2,3].

Для стимуляції запізненого γ -випромінювання від продуктів поділу ядерних матеріалів широко використовуються різні типи нейтронних джерел – реактори, нейтронні генератори, електронні прискорювачі та циклотрони, які генерують теплові, швидкі і високоенергетичні нейтрони [4].

Використання теплових нейтронів для ізотопної ідентифікації обмежене колом лише подільних ядерних матеріалів (^{235}U , ^{239}Pu). Ізотопна ідентифікація фертильних ядерних матеріалів (^{232}Th , ^{238}U) неможлива через малі перерізи (n_{th}, f)-реакцій - $\sim 10^{-5}$ барн [5,6]. Чисельні значення перерізів реакцій поділу фертильних ядерних матеріалів на швидких нейтронах на порядки вище [5,6]. Тобто, для стимуляції реакції поділу широкого кола ядерних матеріалів необхідно використовувати нейтрони різних енергій. Ця обставина прив'язує процедуру аналізу ізотопного складу до місця одночасного знаходження різних типів джерел нейтронів (реактори, нейтронні генератори, циклотрони), що обмежує можливі місця проведення процедури ідентифікації. Тому, для створення оптимальних схем стимуляції затриманого γ -випромінювання від продуктів (^{89}Rb , ^{138}Cs) поділу ядерних матеріалів нейтронами необхідна надійна інформація про значення їх пост-нейтронних виходів для широкого енергетичного діапазону – від теплових до високоенергетичних.

Метою представленої роботи є симуляція пост-нейтронних виходів продуктів ^{89}Rb і ^{138}Cs , утворених при поділі нейтронами ядерних матеріалів (^{232}Th , ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu).

Для реалізації вказаної задачі було проведено комп'ютерне моделювання пост-нейтронних виходів продуктів $Y_{\text{Rb-89}}$, $Y_{\text{Cs-138}}$ та відношень їх значень ($Y_{\text{Rb-89}}/Y_{\text{Cs-138}}$) при поділі актинідів нейтронами. Різниця відношення значень виходів $Y_{\text{Rb-89}}/Y_{\text{Cs-138}}$ у процентах розраховувалася між парами актинідів ^{232}Th і ^{235}U , ^{235}U і ^{238}U , ^{238}U і ^{239}Pu .

Для проведення розрахунків використовувався код Монте Карло – GEF-код [7]. Результати проведеного комп'ютерного експерименту:

- Розраховані значення пост-нейтронних виходів продуктів ^{89}Rb , ^{138}Cs узгоджуються з існуючими значеннями, представленими у базах оцінених ядерних даних EXFOR [5] та ENDF [6], у межах експериментальних похибок при однакових енергіях нейтронів для всього енергетичного діапазону. Треба відмітити, що розраховані відношення виходів вказаних продуктів суттєво залежать від маси актинідів.

- Встановлена різниця значень відношення виходів $Y_{\text{Rb-89}}/Y_{\text{Cs-138}}$ у процентах між парами актинідів ^{232}Th і ^{235}U , ^{235}U і ^{238}U , ^{238}U і ^{239}Pu , яка дорівнює наступним значенням: 34.07, 39.66 і 25.45 для швидких ($E = 1 \text{ MeV}$) нейтронів, та 20.53, 30.00 і 19.54 для високоенергетичних ($E = 14 \text{ MeV}$). Таким чином, пари продуктів ^{89}Rb і ^{138}Cs , утворені при поділі вказаних ядерних матеріалів швидкими і високоенергетичними нейтронами, можуть бути використані як джерела запізненого γ -випромінювання при проведенні аналізу їх ізотопного складу.

- Схема розрахунків дозволяє моделювати значення виходів продуктів поділу актинідів нейтронами, для яких відсутні експериментальні дані.

Результати проведених математичних розрахунків дозволяють оптимізувати процедуру неруйнівного аналізу ізотопного складу ядерних матеріалів при застосуванні джерел нейтронів широкого енергетичного спектру.

[1] M. Grdeń, J. Radioanal Nucl Chem. 323, 677 (2020).

[2] І.В. Пилипчинець та ін., НБУЖУ, сер. Фізика 48, 38 (2020).

[3] Decay radiation search. Decay radiation database version of 3/25/2022.

https://www.nndc.bnl.gov/nudat2/indx_dec.jsp

[4] О.О. Парлаг та ін., Патент на корисну модель № 133090. Бюл. № 6, (2019).

[5] Evaluated Nuclear Data File (ENDF). Database Version of 2022-04-20. <https://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm>

[6] Experimental Nuclear Reaction Data (EXFOR). Database Version of 2023-01-20.

<https://www-nds.iaea.org/exfor/>

[7] GEF 2023/2.1. <http://www.khschmidts-nuclear-web.eu/GEF-2023-2-1.html>
3/25/2022

ELECTRICAL PROPERTIES OF HETEROSTRUCTURES n-InSe/n-Mn₂O₃

I.G. Tkachuk

*Institute for Problems of Materials Science, Chernivtsi Branch, 5, I. Vilde Str., 58001,
Chernivtsi, Ukraine*

e-mail: ivan.tkachuk.1993@gmail.com

Nowadays, thin films of semiconducting metal oxides are of considerable scientific and practical interest. Most vividly, such films reveal themselves in the field of manufacturing heterostructures of various types. They are able to efficiently absorb light in the region of fundamental absorption and remain transparent at photon energies smaller than the band gap. This determines their potential as materials for the manufacture of solar energy devices and optoelectronics. Mn₂O₃/n-InSe heterojunctions were produced by the method of low-temperature spray pyrolysis. An aqueous solution of the appropriate composition was sprayed onto a heated substrate made of a layered n-InSe crystal. As a result, a thin film of Mn₂O₃ was formed on its surface. The use of layered semiconductors makes it possible to obtain high-quality interfaces, even with significant differences in the crystal lattice parameters of the contacting materials. The front layer of the wide-gap semiconductor Mn₂O₃ is transparent in the region of maximum light absorption in InSe. This makes it possible to effectively exploit the photovoltaic properties of the latter.

In (fig. 1a,b) shows the straight lines of the I-V characteristics of the n-Mn₂O₃/n-InSe heterojunction, measured at different temperatures. To analyze the obtained graphs, we will use a well-known formula that takes into account the influence of series and shunt resistances:

$$I = I_s \left[\exp\left(\frac{e(V - IR_s)}{nkT}\right) - 1 \right] + \frac{V - IR_s}{R_{sh}}, \quad (1)$$

where I_s is the saturation current, n is the imperfection coefficient, R_s is the series resistance, R_{sh} is the shunt resistance. Solid curves in fig. 1 represent the results of approximation using formula (1). The value of the differential resistance of the heterojunction (R_{diff}) (see Fig. 1c) was taken as the initial values of R_s and R_{sh} at high voltages V in the saturation region and at $V \approx 0$ V, respectively. A good match between experimental data and theoretical calculations confirms the validity of the selected model and allows us to evaluate the characteristics of the heterojunction n , R_s and R_{sh} . The found values of the fitting parameters are given in the table 1.

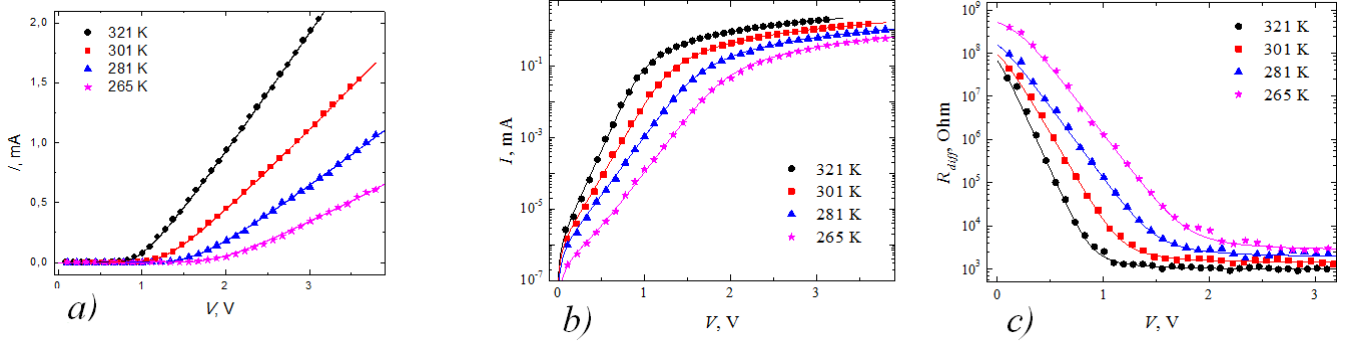


Fig. 1 – Forward I - V characteristics of $\text{Mn}_2\text{O}_3/n\text{-InSe}$ heterojunction at different temperatures (points are experimental data, curves are approximation by formula (1)). Dependence of differential resistance of $\text{Mn}_2\text{O}_3/n\text{-InSe}$ heterojunction on voltage at different temperatures

Table 1 – Fitting parameters

T , K	I_s , 10^{-10} A	n	R_s , Ohm	R_{sh} , 10^8 Ohm
265	0.7	6	2600	7
281	5	5.4	1800	4
301	6	6	1350	2
321	8	2.9	950	0.5

The large value of the shunt resistance indicates that our technology allows to grow high-quality heterojunctions, in which there is no shorting on the sides or through conduction channels in the interface area. The R_s value in $n\text{-Mn}_2\text{O}_3/n\text{-InSe}$ heterostructures is determined by the resistance of the thick InSe base region.

In InSe in the region of the investigated temperatures, the electron concentration increases with T due to electron transitions from a deep uncompensated donor level, and the mobility is determined by optical phonon scattering: $n \sim T^{3/4} \cdot \exp(-E_d/2kT)$, $\mu \sim T^{-3/2}$. Taking this into account, the temperature dependence of electrical conductivity is described by the expression $\sigma(T) \sim T^{-3/4} \cdot \exp(-E_d/2kT)$. Using this formula, it is possible to estimate the depth of the donor level E_d by the slope of the graphical dependence $\ln(\sigma \cdot T^{3/4})$ on $1/T$: $E_d = 0.3$ eV.

СТРУКТУРА ДИФРАКЦІЙНОГО КОНУСА ПРУЖНОГО ПРОТОН-ПРОТОННОГО РОЗСІЯННЯ ПРИ ВИСОКИХ ЕНЕРГІЯХ У МОДЕЛІ МАКСИМАЛЬНОГО ПОМЕРОНА Й ОДДЕРОНА

Н. Бенце¹, І. Сані², О. Лендел³

¹Ужгородський Національний Університет, Ужгород, Україна

²Університет ім. Роланда Етвеша, м. Будапешт, Угорщина

³Інститут електронної Фізики НАН України, Ужгород, Україна

e-mail: bencenorbert007@gmail.com

Досліджено поведінку параметра кривизни як індикатора переходу до асимптотичної області в рамках наближення максимального померона й оддерона при усіх доступних енергіях в межах дифракційного конуса. В цьому наближенні кривизна розглядається як прояв порогової структури амплітуди розсіювання, що впливає з унітарності у крос-каналі. Це наближення одне з небагатьох, де враховано всі базові вимоги і яке задовольняє не тільки теоремі Фруассара для розсіяння вперед, але й теоремі Оберсона-Кіношіти-Мартена для розсіяння не нульового переданого імпульсу.

Нами використано спрощену модель максимального померона й оддерона, в якій амплітуда розсіювання вибрана з урахуванням внеску ведучого порядку трикомпонентного померона й оддерона, що задовільняє асимптотичним теоремам та стандартних внесків їх нижчих порядків, а також внеску вторинних реджеонів. Модель здатна описати широкий круг експериментальних даних у доступній області енергій та переданого імпульсу [1].

Для дослідження нами вибрано вісім наборів експериментальних значень диференціального перерізу пружного розсіяння протонів на протонах в області енергій Накопичувача на Перетинаючих Кільцях (ISR) та два набори дифракційного перерізу пружного розсіяння протонів на протонах в області енергій Коллайдера, у яких чітко видно неекспоненціальну поведінку дифракційного конусу. Залежність нахилу від переданого імпульсу при різних енергіях в моделі має увігнуту форму. Тому в цьому випадку слід користуватися нахилом і параметром кривизни, усередненими на певному інтервалі переданого імпульсу, який визначається максимальним і мінімальним значенням нахилу в межах дифракційного конусу. У цих межах розрахована усереднена кривизна має спадний характер, що якісно відповідає поведінці кривизни, визначеної безпосередньо з експерименту. Модель передбачає зменшення параметра кривизни з енергією, який змінює знак при віддалених значеннях енергії у сотні тераелектронвольт.

[1] N. Bence, A. Lengyel, Z. Tarics, E. Martynov, G. Tersimonov, Eur. Phys. J. A 57, 265 (2021).

ВЛАСТИВОСТІ ГІПЕРЯДРА ${}^4_\Lambda\text{H}$ У ТРИКЛАСТЕРНИХ МІКРОСКОПІЧНИХ МОДЕЛЯХ

М.Д. Солоха-Климчак, О.В. Нестеров

*Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, Київ
e-mail: mariana_sk@ukr.net*

Ядра, що містять у собі разом і нуклони, і гіперони, тобто дивні баріони, називаються гіперядрами. Уперше такі, а саме Λ -гіперядра, були експериментально відкриті М. Данішем і Е. Пневским, які в 1953 році серед продуктів розщеплення ядер частками космічних променів знайшли відносно довго живучі фрагменти, що випромінюють піони. Систематичне ж експериментальне вивчення властивостей гіперядер стало можливим після того, як в Церні був створений пучок K^- мезонів, що дозволило безпосередньо в атомних ядрах утворювати гіперони. Головна причина інтересу до гіперядер полягає в тому, що разом з нуклонними системами з'явилися нові доступні для вивчення системи сильновзаємодіючих частинок, що дозволяє отримати нову інформацію про властивості сильної взаємодії.

Об'єктом нашого розгляду є гіперядро ${}^4_\Lambda\text{H}$, яке стабільне по відношенню до випускання нуклонів і Λ -гіперонів. З експерименту відомо, що це гіперядро має два зв'язані стани з повним орбітальним моментом $L=0$ з $J^\pi=0^+$ і $J^\pi=1^+$. Енергії цих рівнів -2.04 MeV і -1.05 MeV відповідно, при їх відліку від найнижчого порогу розвалу ${}^3\text{H}+\Lambda$. Повна енергія зв'язку ядра в основному стані складає 10.52 MeV, а у збудженому вона дорівнює 9.53 MeV. Різниця енергій вказаних станів обумовлена спін-спіновим розщепленням.

В цій роботі ми використовували дві трикластерні алгебраїчні моделі. Перша з них [1] заснована на представленні функції відносного руху системи трьох кластерів у вигляді розкладу по базису шестивимірною гармонійного осцилятора, заданого в гіперсферичних змінних. Цю модель надалі ми будемо скорочено іменувати АМОБ (Алгебраїчна модель осциляторний базис). Друга модель, скорочено АМГОБ (Алгебраїчна модель гаусівський осциляторний базис) [2], поєднує в собі використання як гаусівського, так і осциляторного базису при розкладанні функції відносного руху кластерів. Оскільки наші моделі є мікроскопічними, то їх основними вхідними параметрами є NN та ΛN потенціали. Як перший ми обрали добре відомий модифікований потенціал Хасегави-Нагати [3], який є напівфеноменогічним, як другий – YNG-NF, один з потенціалів серії YNG [4].

В першу чергу ми порівнюємо свої результати з результатами роботи [5], де вирішувалася чотирьохчастинкова задача для ${}^4_\Lambda\text{H}$. Розрахунки виконувалися в рамках варіаційного методу. Як NN-потенціал використовувався потенціал AV8, а ΛN -взаємодія задавалася за допомогою потенціалу NSC97f. Результати цієї роботи з повної енергії зв'язку, поряд з нашими і експериментальними даними, наведені в таблиці.

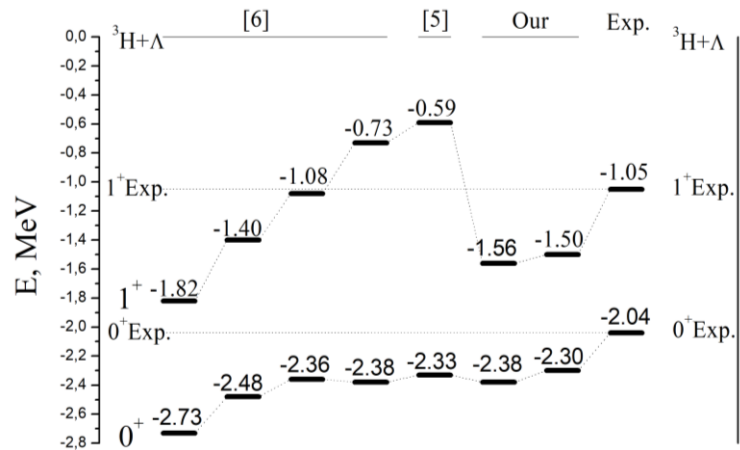
Таблиця. Значення енергій зв'язку станів 0^+ і 1^+ , отримані в роботі [5], і наші результати. В [5] $E(^3\text{H}) = -7.77$ MeV, у нас $E(^3\text{H}) = -7.74$ MeV. В таблиці всі енергії наведені в MeV.

Стани	Результати роботи [22]	Наші результати		Експеримент
		АМОВ	АМГОВ	
0^+	-10.10	-10.12	-10.04	-10.52
1^+	-8.36	-9.30	-9.24	-9.53

Наші енергії зв'язку для ^3H близькі до тих, які отримані в [5], так само як і енергії основних станів. У той час як для стану 1^+ енергії досить сильно різняться. Швидше за все це пов'язано з тим, що сильно завищене спін-спінове розщеплення від самого початку закладено в потенціалах NS.

Для того, щоб зробити порівняння наших результатів з енергії зв'язку з теоретичними результатами інших авторів і експериментальними даними більш наочним, наведено рисунок, де енергії зв'язку відраховуються від порогів розвалу $^3\text{H} + \Lambda$. На цьому рисунку також представлені результати роботи [6], отримані з використанням моделі оболонки без кору (NCSM).

Зіставлення наших результатів з експериментальними даними і порівняння з результатами найбільш послідовних теоретичних робіт показує, що на даний момент часу поки не вдається точно описати порівняно простий спектр зв'язаних станів гіперядра $^4_\Lambda\text{H}$. На нашу думку,



переважно це пов'язано з невизначеністю з потенціалами взаємодії між частинками, і в першу чергу ΛN -потенціалу. При цьому результати наших розрахунків не випадають з ряду результатів розрахунків, проведених в найбільш точних нині моделях, і дозволяють вказати на деякі особливості структури $^4_\Lambda\text{H}$.

Рисунок. Порівняння наших результатів з результатами теоретичних робіт інших авторів і експериментальними даними.

- [1] A. V. Nesterov et al. Elem. Chast. At. Yadro 41, 1337 (2010).
- [2] V. S. Vasilevsky et al. Nucl. Phys. A 824, 37 (2009).
- [3] A. Hasegawa, S. Nagata, Prog. Theor. Phys. 45, 1786 (1971).
- [4] Y. Yamamoto et al, Prog. Theor. Phys. Supplement No 177, 361 (1994).
- [5] E. Hiyama et al, Phys. Rev. C, 65, 011301, (2001).
- [6] R. Wirth et al. Hypernuclear no-core shell model, Phys. Rev. C 97, 064315, (2018).

РОЛЬ СТОХАСТИЧНИХ ФАКТОРІВ У КІНЕТИЦІ ТЕРМОВИСВІЧУВАННЯ ЛЮМІНОФОРІВ: МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

П.В. Яворський¹, П.С. Деречкей¹, О.М. Поп¹, В.Т. Маслюк¹,
С.Ф. Гончарова², Ф.Ф. Полої²

¹*Інститут електронної фізики Національної академії наук України, Ужгород*
²*Державний вищий навчальний заклад «Ужгородський національний університет»,
Ужгород
e-mail: petro0798@gmail.com*

Відомо, що оптичні (люмінесцентні) методи широко використовуються для дослідження структури енергетичних рівнів у напівпровідниках, а також у прикладних цілях, наприклад, для задач дозиметрії. В останньому випадку використовуються широкозонні матеріали, а відповідна структура енергетичних рівнів створюється шляхом їх легування або створенням технологічних дефектів. Як правило, така енергетична структура є чутливою до режимів обробки матеріалів і містить елементи розупорядкування, які впливають на робочі характеристики дозиметрів. Тому важливим є розробка теоретичної методики, що дозволяє врахувати вплив випадкових факторів на оптичні характеристики матеріалів.

Як правило, вивчення природи центрів свічення у широкозонних напівпровідниках потребує використання комплексу методів досліджень – явищ фосфоресценції (Ф), термостимульованої люмінесценції (ТСЛ), а також методів часткового висвічування (МЧВ) та вибір адекватних теоретичних моделей. Отримані експериментальні криві необхідно порівнювати з теоретичними залежностями, отриманих при різних виборах параметрів теоретичних моделей.

У даній роботі представлено результати числового моделювання кінетики ТСЛ не лише для повної системи кінетичних рівнянь, але й при врахуванні стохастичного розмиття енергетичних рівнів системи. В основі програмного забезпечення як метод моделювання випадкових величин з метою обчислення характеристик їх розподілу використано метод Монте-Карло.

Розроблене програмне забезпечення складається з трьох вікон, які моделюють процеси ТСЛ, фосфоресценції і часткового висвічування. Це дає можливість знаходження масивів кінетичних та енергетичних параметрів, що відтворюють поведінку експериментальних даних досліджуваних напівпровідників. Програма має інтуїтивно зрозумілий і простий у користуванні графічний інтерфейс, що забезпечує зручну взаємодію з даними, оптимізує процес розрахунку й уможливорює швидке отримання результатів. У вікнах програми містяться поля вводу необхідних коефіцієнтів для моделювання процесів. У програмі проводяться розрахунки з можливістю побудови графіку висвічування за

заданий проміжок часу. Форма кривої термовисвічування залежить як від властивостей досліджуваного матеріалу, так і від умов збудження, зберігання та висвічування. Тому при аналізі кривої термовисвічування необхідно враховувати всі ці фактори. Варто відмітити, що теоретично розрахована крива наближено близька до експериментальної та дозволяє враховувати похибку апроксимації.

Розроблена програма написана за допомогою мови програмування C++ в середовищі розробки VisualStudio. Програма призначена для наочного представлення імітації моделювання дозиметричних процесів. Рисунок 1 демонструє поведінку сигналу ТСЛ при врахуванні статистичного розкиду енергетичних параметрів моделі.

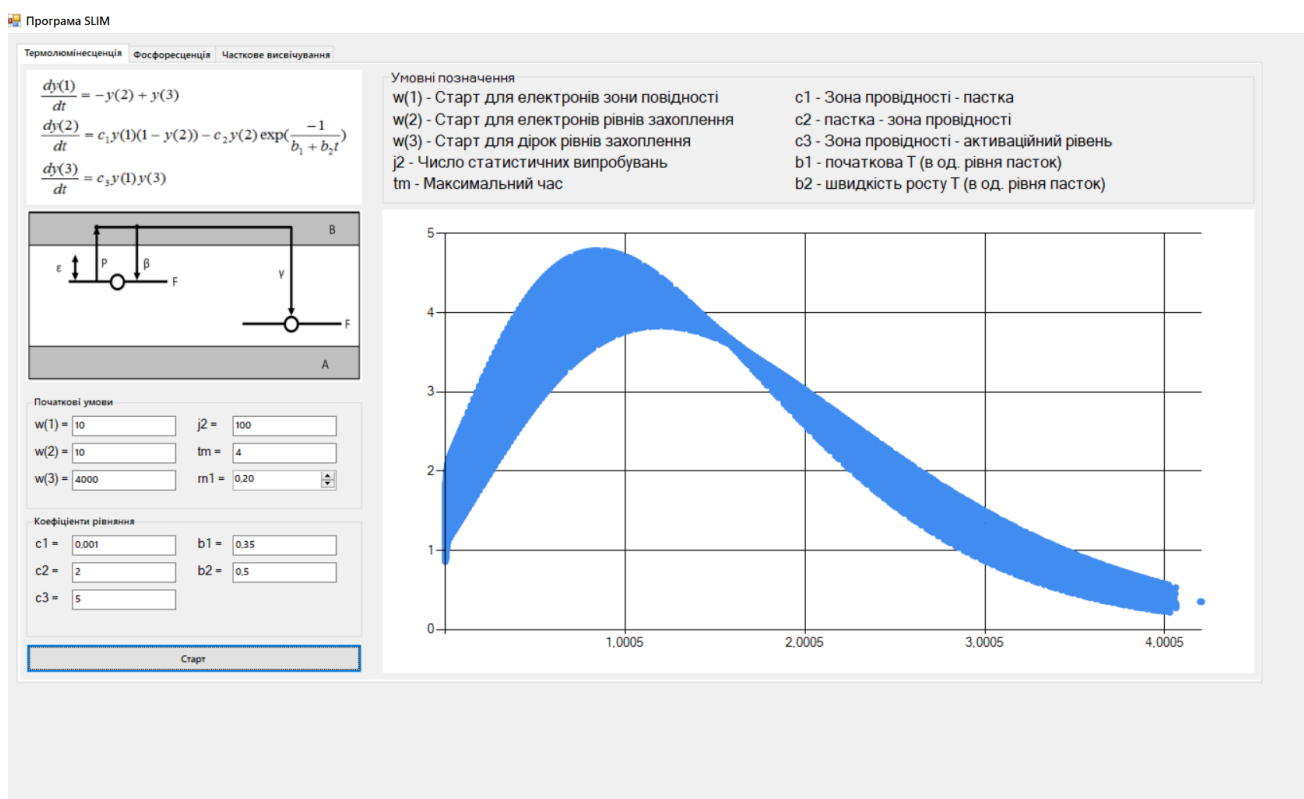


Рис. 1. Поведінка сигналу ТСЛ при врахуванні статистичного розкиду енергетичних параметрів моделі

Отже, розроблене програмне забезпечення надає можливість теоретично описувати експериментальні криві, отримати параметри для розрахунку енергетичних рівнів. Обговорюються можливості запропонованої теоретичної моделі та застосування її для обробки експериментальних даних, отриманих для дозиметричних матеріалів.

РОЗРАХУНКИ СТРУКТУРИ АТОМА ТИТАНУ З ВІДКРИТИМИ *d*-ОБОЛОНКАМИ

М.В. Товт, В.Ю. Лазур, Є.А. Нодь

*ДВНЗ «Ужгородський національний університет»
e-mail: mariana.tovt@uzhnu.edu.ua*

Атом титану належить до елементів IV групи Періодичної системи. Спектр атома титану, згідно даних NIST [1], є набагато складнішим за спектри атомів з розімкнутими *s*- та *p*-оболонками. Наявність в атомі титану двох еквівалентних *d*-електронів у незаповненій оболонці різко ускладнює весь процес одно- і багатоконфігураційних розрахунків структури атома Ti в наближенні Хартрі-Фока (ХФ). Велика кількість проміжних термів у d^3 -оболонці та d^2 -оболонці і, відповідно, розмаїття кінцевих збуджених станів атома Ti з конфігурацій $3d^3(^{4,2}Z)4s$, $3d^2(^{3,1}Z)4s4p$, $3d^3(^{4,2}Z)4p$ наразі перекриває можливості стандартних MCHF-пакетів щодо охоплення в одному ХФ-розрахунку всіх спектроскопічних станів з однаковим термом.

Нами проведені одно- та багатоконфігураційні ХФ розрахунки структури атома титану в *LS*-наближенні. За допомогою пакету MCHF [2] нараховані, у розкладі сильного зв'язку, 42 нижні фізичні стани мішені з конфігураціями $3d^2(^3F)4s^2$ (основний стан), $3d^2(^1D, ^3P, ^1G)4s^2$, $3d^3(^4F, ^4P, ^2G, ^2D_2, ^2P, ^2H, ^2F)4s$ та $3d^2(^3F, ^3P, ^1D)4s4p$ ($^3, ^1P^o$) – зі всіма можливими комбінаціями проміжних термів, які (терми) вказані у круглих дужках. Як видно з переліку, більшість врахованих конфігурацій містить дві, а то й три відкриті *s*-, *p*-, *d*-оболонки, що значно ускладнює розрахунки. Для контролю збіжності розкладу, окрім фізичних станів атома Ti I, нами були використані два набори псевдостанів: $8l$ та $9l$ ($l = s, p, d, f$).

Точність обчислень встановлена нами шляхом порівняння теоретичних значень енергій рівнів з експериментальними даними NIST [1], що у наших розрахунках переважно складає ~0.05-0.5 еВ. Кілька станів, включених у даний розклад сильного зв'язку, ще не розраховані до кінця. Це пов'язано, насамперед, з наявністю об'єктивних обчислювальних труднощів, зумовлених вакансіями у внутрішніх оболонках, та з великою кількістю одноелектронних орбіталей, які треба брати до уваги у кожному окремому MCHF-розрахунку.

- [1] Kramida, A., R. Tichenko, Yu., Reader, J., and NIST ASD Team (2012). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.0), [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [2013, April 13]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
- [2] Froese Fischer C. Comput. Phys. Commun. 64, 369 (1991).

ПОВНИЙ ПЕРЕРІЗ ОДНОКРАТНОЇ ІОНІЗАЦІЇ АТОМА КАЛІЮ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ

В.І. Роман

Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: viktoriyaroman11@gmail.com

Важливість дослідження процесу збудження субвалентних оболонок (автоіонізації) у важких лужних атомах було показано майже 100 років тому [1], проте як експериментальні, так і теоретичні дослідження цих атомів є дуже нечисельними навіть до сьогодні. Нещодавно нами було проведено теоретичне дослідження збудження та іонізації окремих електронних оболонок атома рубідію [2], яке дало змогу оцінити вклад кожної з них у переріз повної однократної іонізації, що є дуже важливим для фізики плазми. Тут ми представляємо результати теоретичних розрахунків перерізів збудження $3p^6$, $3s^2$ та іонізації $4s$, $3p^6$, $3s^2$ оболонок атома калію, які порівнюємо з наявними експериментальними [1, 3] та теоретичними [4] даними повного перерізу однократної іонізації цього атома.

Чому саме ці оболонки та процеси було обрано нами для аналізу? Форма та величина повного перерізу іонізації σ_{tot} визначається сумарним внеском парціальних перерізів прямої іонізації та перерізів збудження окремих електронних оболонок $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{ion}} + \sigma_{\text{exc}}$. Аналіз, проведений нами в роботі [6] показав, що основний внесок в повний переріз однократної іонізації дає пряма іонізація трьох зовнішніх оболонок – перерізи $\sigma_{\text{ion}}(4s)$, $\sigma_{\text{ion}}(3p^6)$ та $\sigma_{\text{ion}}(3s^2)$. Всі інші більш глибокі оболонки дають сумарний внесок не більше 1%, тому в даній роботі вони не розглядалися. Щодо процесу збудження, то для лужного атома калію тільки дві субвалентні оболонки дають внесок у формування перерізу збудження та відповідно повного перерізу іонізації, а саме перерізи $\sigma_{\text{exc}}(3p^6)$ та $\sigma_{\text{exc}}(3s^2)$, що показано нами в [7].

Розрахунки перерізів збудження були проведені у релятивістському наближенні спотворених хвиль (РСХ). Переріз збудження $3p^6$ оболонки був отриманий як сума 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 $3s 4s^2$, $3s 4s4p$, $3s 4s4d$, $3s 4s5s$, $3s 4s3d$, $3s 5s5p$, $3s 4s6s$. Розрахунки перерізів іонізації були проведені у трьох релятивістських наближеннях – бінарних зіткнень (РБЗ), спотворених хвиль та Кулон-Борна. Всі розрахунки проведені у рамках програмного пакета Flexible Atomic Code [5]. Детальний аналіз отриманих нами перерізів іонізації атома калію показав, що найкраще узгодження з експериментальним перерізом [1] в області до порогу збудження $3p^6$ оболонки дає наближення бінарних зіткнень, тому для подальшого аналізу було обрані саме ці дані (див. рис.1).

Порівняння з експериментальними даними [1] повного перерізу однократної іонізації, приведених на рис. 1, показує задовільне узгодження із нашими розрахунками у всьому дослідженому енергетичному діапазоні. А це дозволяє нам визначити, що збудження $3s^2$ оболонки дає внесок 7% у переріз автоіонізації та $\approx 1,5\%$ у повний переріз іонізації атома К. Разом з тим, показано, що збудження $3p^6$ оболонки є основним процесом автоіонізації цього атома і дає внесок 29% у його повний переріз однократної іонізації. Процес прямої іонізації $3p^6$, $3s^2$ оболонок – дає внесок у повний переріз однократної іонізації атома К до 24% та 1%, відповідно. Оцінки внеску обчислені у максимумах відповідних перерізів збудження та іонізації.

Проведені дослідження показали, що, як і у випадку атома рубідію [2], процес збудження субвалентної p^6 оболонки атома калію є ще більш ефективним процесом, ніж його пряма іонізація, тому цей непрямий процес потребує подальшого дослідження для всіх лужних атомів.

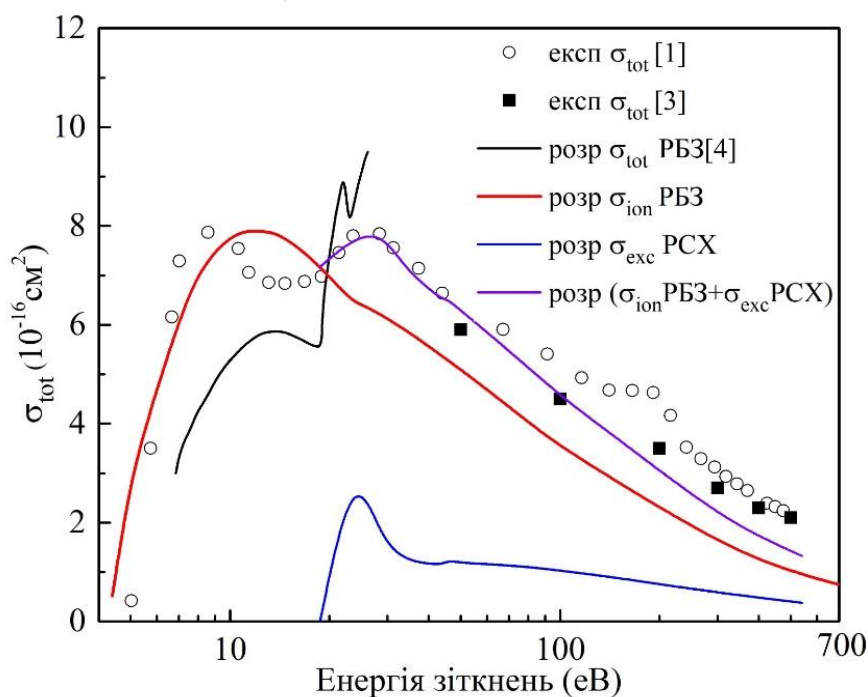


Рис.1. Повний переріз σ_{tot} однократної іонізації атома калію: точки - експериментальні дані; — сумарний теоретичний переріз $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{ion}}(4s + 3p^6 + 3s^2) + \sigma_{\text{exc}}(3p^6 + 3s^2)$

- [1] J. Tate, P. Smith, Phys. Rev. 46, 773 (1934).
- [2] V. Roman et al., J. Phys. B. 48, 205204 (2015).
- [3] R. Mcfarland, et al, Phys. Rev. 137, 1058 (1965).
- [4] B. Roy, D. Rai, Phys. Rev. A, 8, 849 (1973).
- [5] M. Gu, Can. J. Phys. 86, 675 (2008).
- [6] V. Roman, Book of abstract ICPEAC-2023, Ottawa, Canada (accepted for publ.).
- [7] В. Роман, Матеріали конференції ІЕФ-2021, Ужгород, 173 (2021).

ПЕРЕРІЗ ФОТОНЕЙТРОННОЇ РЕАКЦІЇ НА ЛЕГКОМУ ІЗОТОПІ ТЕЛУР-120

П.С. Деречкей, З.М. Біган, О.М. Поп

*Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна
e-mail: derecskei89@gmail.com*

Легкий ізотоп телуру – Te^{120} – належить до р-ядер. Р-ядра – це нейтронно-дефіцитні стабільні ізотопи, які екрановані від захоплення швидких нейтронів стабільними ізобарами. Вони одержуються в результаті ряду фотоядерних реакцій (γ, n) , (γ, p) , (γ, α) . Для обчислень багатьох р-процесів необхідна бібліотека даних, що включає десятки перерізів фотоядерних реакцій, але експериментальної інформації про характеристики фотоядерних реакцій не вистачає.

Фотонейтронна реакція на телурі-120 вивчалася у відділі фотоядерних процесів Інституту електронної фізики НАН України. Вимірювання проводилося на гальмівному гамма-пучку мікротрона М-30. Опромінення досліджуваних зразків проводилося в інтервалі максимальних енергій гальмівного гамма-пучка $E_{\gamma\text{max}}=10-19$ МеВ з кроком 0,5 МеВ. Розкид електронного пучка по енергії не перевищував 30 – 50 кеВ.

Для проведення досліджень була використана активаційна методика. Досліджувані мішені були виготовлені у вигляді дисків зі склоподібного окису телуру TeO діаметром 25 мм і товщиною 2 мм (чистота 99,99 %). Час опромінення складав 2 години при енергіях біля порогу (γ, n) реакції і 20 хвилин - при вищих енергіях. Часи охолодження і вимірювання вибиралися з оптимальних умов реєстрації гамма-ліній від розпаду дочірніх ядер. При цьому мертвий час реєструючої апаратури був менше 3%.

Для нормування і калібровки виходів реакцій $^{120}\text{Te}(\gamma, n)^{119}\text{Te}$ паралельно з вимірюванням гамма-ліній від розпаду ^{119}Te проводилося вимірювання гамма-ліній від розпаду ^{129}Te , одержаного в реакції $^{130}\text{Te}(\gamma, n)^{129}\text{Te}$. В результаті були одержані виходи збудження основного й ізомерного станів ізотопу ^{119}Te і ізотопу ^{129}Te . Для всіх ізотопів телуру в реакціях (γ, n) заселяються основні і ізомерні стани. При цьому повний вихід (γ, n) реакції Y_n зв'язаний з виходами збудження основного Y_g і ізомерного Y_m стану наступним чином: $Y_n = Y_g + Y_m$.

Отже, вимірюючи виходи заселення в реакції (γ, n) основних і ізомерних станів ізотопів телуру, ми визначили відношення повних виходів реакції (γ, n) на ізотопі ^{120}Te до повного виходу реакції $^{130}\text{Te}(\gamma, n)^{129}\text{Te}$, тобто $Y_n^{120}\text{Te} / Y_n^{130}\text{Te}$. Одержані результати приведені на рис. 1. Середньоквадратична похибка становить менше 1% і не перевищує розміри точки.

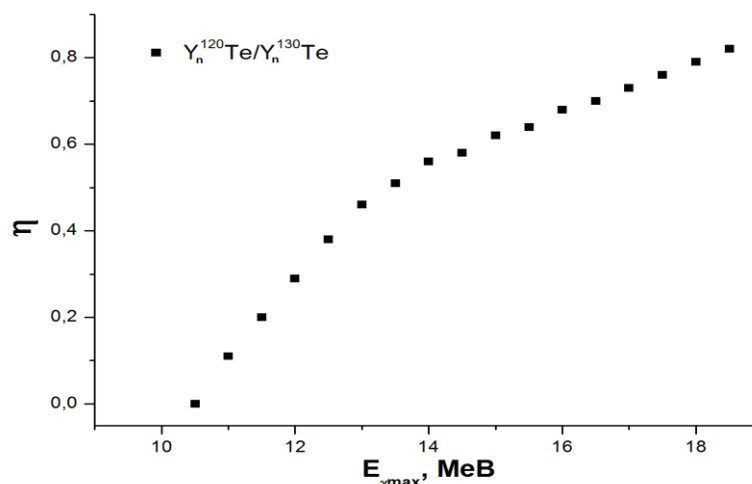


Рис.1. Відношення виходів $Y_n^{120}Te / Y_n^{130}Te$ в (γ, n) реакції.

Наявність експериментальних залежностей відношення виходів від максимальної енергії гальмівного гамма-спектру дозволяє використовуючи перерізи реакції $^{130}Te(\gamma, n)^{129}Te$ [1] розрахувати перерізи реакції $^{120}Te(\gamma, n)^{119}Te$. Розрахунок вівся методом оберненої матриці з кроком 1 MeV. Одержані перерізи приведені на рис. 2.

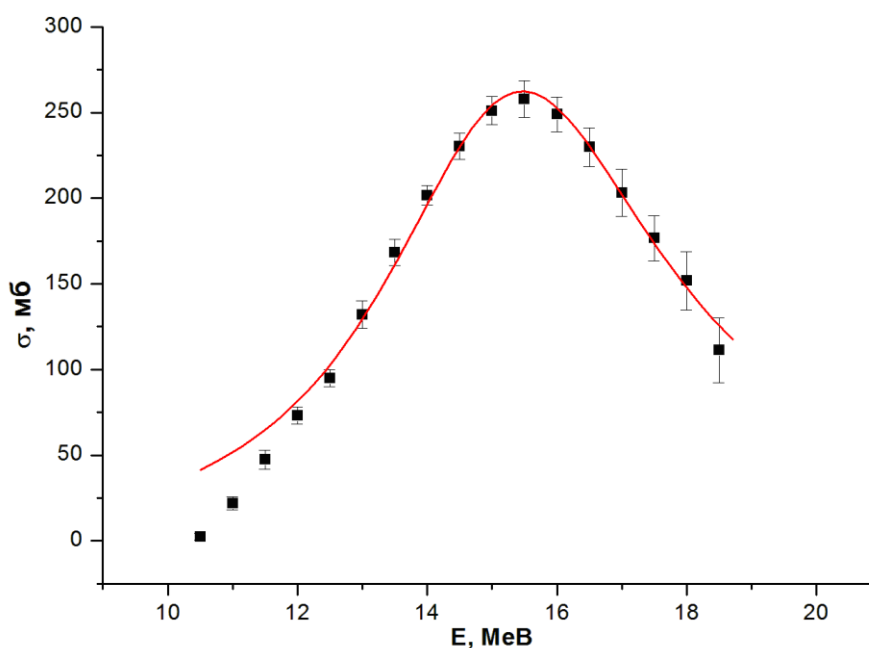


Рис. 2. Перерізи реакції $^{120}Te(\gamma, n)^{119}Te$.

Перерізи мають одnogорбу форму з максимумом при енергії $\sim 15,4$ MeV. Суцільною кривою на рис.2 приведений результат апроксимації перерізу кривою Лоренца.

[1] A. Lepretre, H. Beil, R. Bergere et al. Nucl. Phys. 258A, 350 (1976).

SPECTRAL STUDIES OF SOLID SOLUTIONS OF THE $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ – $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ SYSTEM WITH ARGYRODITE STRUCTURE

I.O. Shender, A.I. Pogodin, M.Y. Philep, T.O. Malakhovska,
O.P. Kokhan, L.M. Suslikov

*Uzhhorod National University, Pidhirna St. 46, Uzhhorod, Ukraine
e-mail: iryna.shender@uzhnu.edu.ua*

Superionic compounds $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ and $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ belong to a large family of compounds with the argyrodite structure [1,2]. Tetrahalogenides $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ and $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ are characterized by high ionic conductivity and intrinsic structural disorder caused by the presence of vacancies in the Ag^+ cation sublattice [3].

This work is devoted to the comparison of the determination of the pseudo-band gap of solid solutions of the $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$ ($x=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$) composition by the methods of optical spectroscopy (optical absorption and diffuse reflection).

Optical absorption spectroscopy was performed on thin plane-parallel single crystal samples. Diffuse reflectance spectra were obtained on samples in the form of microcrystalline powders ($\sim 10\text{-}20\ \mu\text{m}$). The pseudo-gap energy of $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$ solid solutions was determined on the basis of the logarithmic dependence of the absorption coefficient according to Urbach and on the basis of the dependence of the Kubelka-Munk function using the Tauc graphic method.

It was established that the values of the width of the pseudo-gap E_g obtained from the results of the analysis of the spectra of diffuse reflection of microcrystallites of solid solutions and the spectral dependences of the absorption index for single crystals of solid solutions $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$ ($x=0; 0.2; 0.4; 0.6; 0.8; 1$) do not differ more than 5%.

Therefore, it is correct to use a non-destructive and simple method, diffuse reflection spectroscopy, to estimate the value of the pseudo-gap of porous, poly-, micro- and nanocrystalline objects.

- [1] W.F. Kuhs, R. Nitsche, K. Scheunemann, Mat. Res. Bull. 14, 241(1979).
- [2] G. Săbău, M.E. Cioacă, M. Munteanu, D. Bîrgăoanu, O.C. Ciobotea-Barbu, Romanian Journal of Mineral Deposits, 89(1-2), 93 (2016).
- [3] I.P. Studenyak, A.I. Pogodin, I.A. Shender, M.J. Filep, O.P. Kokhan, P. Kopčanský, Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics., 24(3), 241 (2021).

TOWARDS UNDERSTANDING THE ELECTRONIC STRUCTURE OF GASEOUS QUINOLINES BY SYNCHROTRON RADIATION

O. Plekan¹, C. Grazioli², M. Coreno³, M. Di Fraia¹, K. C. Prince¹, R. Richter¹
and A. Ponzi⁴

¹*Elettra-Sincrotrone Trieste S.C.p.A., in Area Science Park, 34149 Basovizza, Trieste, Italy,*

²*IOM-CNR, Istituto Officina dei Materiali, Basovizza SS-14, Km 163.5, 34149 Trieste, Italy*

³*CNR-Istituto di Struttura Della Materia (CNR-ISM), in Area Science Park, 34149 Basovizza, Trieste, Italy,*

⁴*Ruđer Bošković Institute, Bijenička cesta 54, 10000, Zagreb, Croatia.*

oksana.plekan@elettra.eu

Among pharmacologically relevant heterocycles, quinoline (see Fig.1 (a)) and its derivatives are significant because of their wide spectrum of biological and chemical applications as well as their presence in naturally occurring substances. Quinolines are widely used in the field of drug design [1-3]. Indeed, they exhibit a considerable activity against several viruses, including antibiotic, anticancer, anti-inflammatory, antihypertensive, and antitubercular properties. The discovery of chloroquine, the most famous drug containing the quinoline scaffold, resulted in the control and eradication of malaria for decades [4].

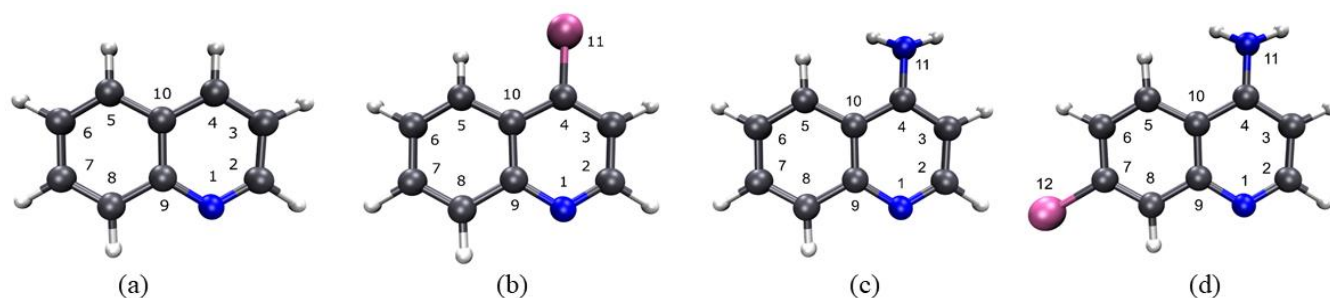


Fig.1. Ball-and-Stick representations of (a) quinoline (C_9H_7N) and three derivatives: (b) 4-chloroquinoline (C_9H_6ClN), (c) 4-aminoquinoline ($C_9H_8N_2$), and (d) 4-amino-7-chloroquinoline ($C_9H_7ClN_2$). The C (gray), Cl (pink) and N (blue) atoms are numbered.

Moreover, quinolines have been observed in planetary atmospheres [5] and in the interstellar medium [6]. Therefore, the spectroscopic properties of quinoline in the gas phase are of potential interest for astrophysical studies and observations, as well as for cosmochemical theoretical simulations. Recently, the comprehensive review about dissociative photoionisation of quinoline induced by VUV radiation has been published by Kadhane et al. [7]. Authors of [7] have concluded that decay products observed in this

work have been found abundantly in Titan's atmosphere. Hence, considering the astronomical importance of quinoline and *in situ* confirmation of the presence of large sized nitrogenated hydrocarbons in Titan's atmosphere, their observations indicate the possible role of nitrogen containing heterocycles in the equilibrium composition of Titan's atmosphere, asteroids and even cometary surroundings, which warrants further investigation.

In view of the mechanism of biological and astronomical importance of quinolines, a comprehensive analysis of their electronic structure under isolated conditions becomes crucial. Some quinolines decompose during evaporation, which makes them unsuitable for photoelectron spectroscopic analysis. Thus, in the present work, we have studied those substituted quinolines that contain halogen ($-\text{Cl}$) or amino groups ($-\text{NH}_2$) since these groups appear to be important for medicinal properties (see Fig. 1 (b–d)). We have provided an extensive electronic structure analysis for three substituted quinolines - in direct comparison to the parent compound - by combining valence band (VB), X-ray photoemission (XPS) and near edge X-ray absorption fine structure (NEXAFS) spectroscopy with theoretical calculations.

- [1] S. Kumar, S. Bawa, H. Gupta. Mini- Rev. Med. Chem. 9, 1648 (2009).
- [2] V.R. Solomon and H. Lee. Curr. Med. Chem. 18, 1488 (2011).
- [3] R. Musiol. Expert Opin. Drug Discov. 12, 583 (2017).
- [4] K. Kaur, M. Jain, R.P. Reddy, R. Jain. Eur. J. Med. Chem. 45, 3245 (2010).
- [5] A.G.G.M. Tielens. Rev. Mod. Phys. 85, 1021 (2013).
- [6] M.A. Sephton. Nat. Prod. Rep. 19, 292 (2002).
- [7] U.R. Kadhane, M.V. Vinitha, K. Ramanathan, S. Arun, J. Bouwman, L. Avaldi, P. Bolognesi, R. Richter. J. Chem. Phys. 156, 244304 (2022).

SPIKE-LIKE TRANSIENT CURRENT IN A SINGLE-MOLECULAR FIELD-EFFECT TRANSISTOR

V. O. Leonov, Ye. V. Shevchenko, E. G. Petrov

Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of NAS of Ukraine, Kyiv
e-mail: leogluck@gmail.com

The molecular photodiode is a nanoscale structure consisting of a fluorophore molecule that is placed in between two metal electrodes (1M2-system). In such a system the energy of the quantum of light can be converted to the electrons flow within the system under certain conditions. The gate electrode controls the current through the system by shifting molecular orbitals' energies (Figure 1). This makes the system act like a field-effect transistor.

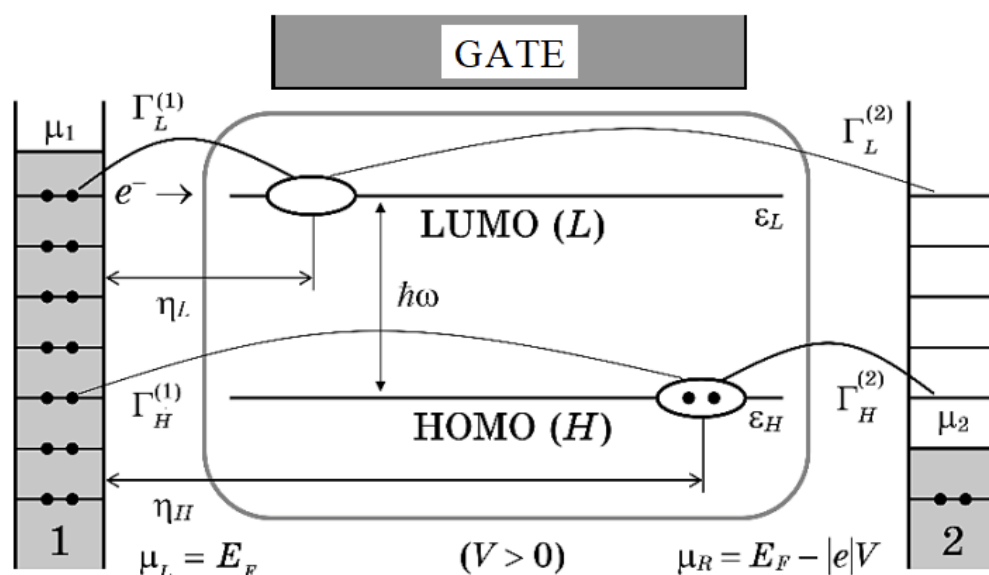


Figure 1.

Using a nonequilibrium density matrix approach we described the phenomenon of current formation in the 1M2-system placed in the photon field. The transient current, $I(t)$, reflects the process of establishing a stationary charge transfer mode in a current-carrying system [1,2]. In a single-molecule field-effect transistor, the currents $I(1)(t)$ and $I(2)(t)$ through the corresponding electrodes 1 and 2 are controlled by the bias (V_b) and gate (V_G) voltages, as well as the optical field. Due to the optical field, the excited singlet term of the molecule is also involved in electron transfer. We showed that such activation can be observed with a transient current, which manifests itself in a symmetrical or asymmetric form depending on the strength of the coupling to electrodes 1 and 2 (parameters $\Gamma(1)$ and $\Gamma(2)$, respectively). One of the examples is shown in figure

2 at a certain rate $k_s(f)$ of the optical singlet-singlet transitions for symmetric ($\eta_H=0.5$) and asymmetric ($\eta_H=0.6$) cases, where η_H is a relative shift of electron density alongside HOMO orbital [2].

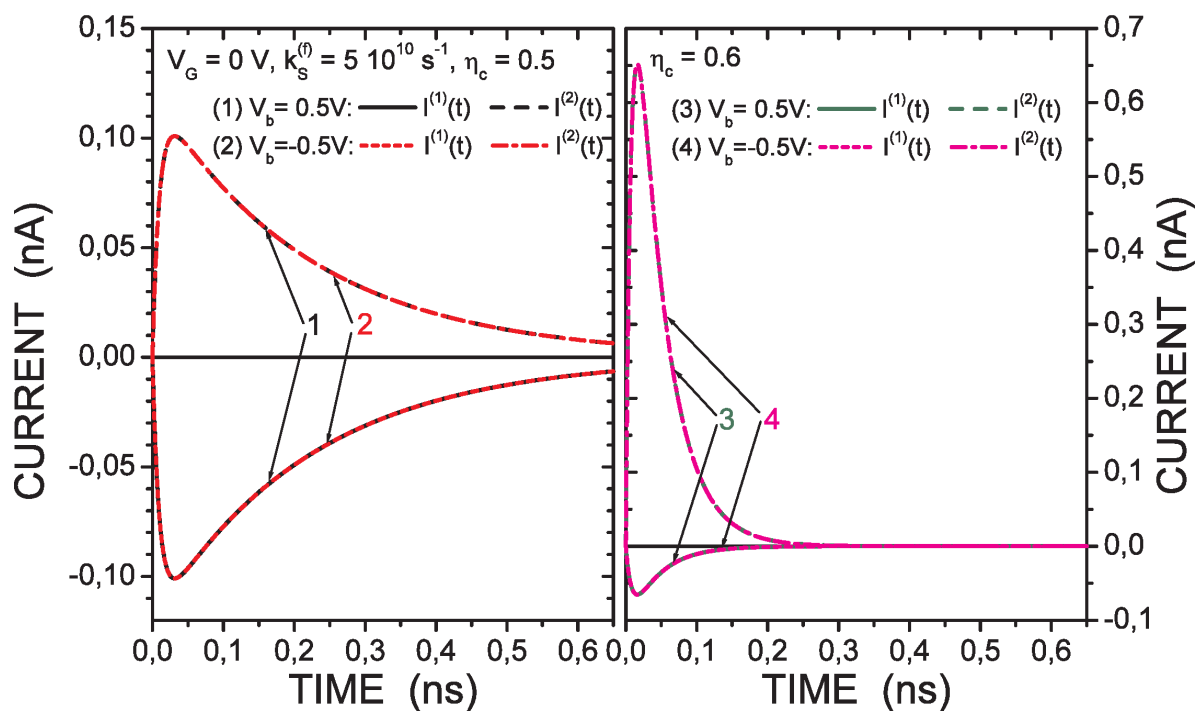


Figure 2

- [1] E.G. Petrov, V.O. Leonov, V. Snitsarev, J. Chem. Phys. 138, 184709 (2013).
 [2] E.G. Petrov, Ye.V. Shevchenko, V.V. Gorbach, S. Lyubchik, A. Lyubchik, AIP Advantes, 12, 105020 (2022).

МОДЕЛЮВАННЯ ВАРІАЦІЙ ПАРАМЕТРІВ ДИНАМІЧНИХ ТА ТЕПЛОВИХ ПРОЦЕСІВ У ГЕОКОСМОСІ НАД УКРАЇНОЮ У ПЕРІОД МАКСИМУМУ 24-ГО ЦИКЛУ СОНЯЧНОЇ АКТИВНОСТІ

В.В. Колодяжний^{1,2}, М.В. Ляшенко¹, Л.Я. Ємельянов¹, Д.А. Дзюбанов²

¹ Інститут іоносфери НАН і МОН України, м. Харків

² Національний технічний університет

«Харківський політехнічний інститут», м. Харків

e-mail: iion@iion.org.ua

Проведено напівемпіричне моделювання просторово-часових варіацій параметрів динамічних та теплових процесів в іоносферній плазмі на фазі максимуму 24-го циклу сонячної активності (2012–2015 рр.) з використанням даних, отриманих за допомогою харківського радара некогерентного розсіяння. Наведені вихідні теоретичні співвідношення для розрахунку параметрів динамічних і теплових процесів в іоносфері. Для розрахунку параметрів нейтральної атмосфери використано емпіричну модель NRLMSISE-00 [1].

Для типових геофізичних періодів (весняне та осіннє рівнодення, літнє та зимове сонцестояння) побудовано та проаналізовано добові варіації параметрів динамічних та теплових процесів в іоносфері на висотах від 210 до 450 км.

Розраховано значення швидкості перенесення плазми за рахунок амбіполярної дифузії, густини повного потоку плазми та потоку заряджених частинок за рахунок амбіполярної дифузії, значення енергії, що підводиться до електронного газу, густини потоку тепла, яке переноситься електронами з плазмосфери до іоносфери, а також швидкості еквівалентного нейтрального вітру та меридіональної складової швидкості нейтрального вітру.

Виявлено, що для досліджуваних періодів зміни у варіаціях космічної погоди призводять до істотних змін у просторово-часових варіаціях параметрів динамічних та теплових процесів в іоносфері. Кількісні та якісні характеристики цих параметрів зазнають змін під час збурень космічної погоди навіть при незначному посиленні геомагнітної активності. Причинами таких змін можуть бути посилення горизонтальних термосферних вітрів та проникнення зональних магнітосферних електричних полів в середні широти в періоди рівнодень.

Отримані результати розрахунків можуть використовуватися у фундаментальних дослідженнях сонячно-земних зв'язків і геокосмосу, для вирішення прикладних задач, які пов'язані з можливістю прогнозування стану космічної погоди, а також для подальшого розвитку регіональної моделі іоносфери CERIM ION.

[1] J. M. Picone , A. E. Hedin , D. P. Drob, A. C. Aikin, J. Geophys. Res. 107, № A12, 1 (2002).

ОСОБЛИВОСТІ АГРЕГАЦІЇ ЦІАНІНОВИХ БАРВНИКІВ У МАТРИЦЯХ TiO_2

П.В. Пісклова, І.Ю. Рopaкова, І.І. Беспалова, С.Л. Єфімова, О.В. Сорокін

Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України, Харків
e-mail: polinkapisklova@gmail.com

J-агрегати – це нанорозмірні люмінесцентні кластери, утворені органічними молекулами. Ці скупчення отримали назву від свого першого винахідника Е. Джеллі. Завдяки високому порядку впорядкованості мономерів у J-агрегатах та сильному міжмолекулярному зв'язку між мономерами, електронні збудження J-агрегатів являють собою екситони Френкеля, що делокалізовані на певній кількості мономерів (N_{coh} – екситонна когерентна довжина). Як наслідок, спектроскопічні властивості J-агрегатів значно відрізняються від властивостей мономерів. J-агрегати характеризуються вузькою смугою поглинання (J-смугою), зміщеною в червоний колір відносно до мономерної, майже резонансною люмінесценцією з набагато меншим часом загасання люмінесценції, ніж у мономерів, через ефект екситонного надвипромінювання [1]. Унікальні властивості J-агрегатів забезпечують їх широке застосування в різних областях, таких як фотоніка, сенсорика, фотоелектрична техніка, біологія тощо.

Актуальним завданням є створення твердих зразків J-агрегатів, які мають вищу фото- та фізичну стабільність порівняно з розчинами. Таким чином, вони є перспективними для різноманітних застосувань. Такі зразки можуть бути отримані, наприклад, у вигляді полімерних плівок або пористих матриць.

В даний час матеріали на основі діоксиду титану широко вивчаються і використовуються завдяки своїм унікальним властивостям. TiO_2 – недорогий, екологічно чистий матеріал, широко поширений у природі, стійкий до УФ-випромінювання. Він має напівпровідникові властивості і при поглинанні кванта електромагнітного випромінювання здатний генерувати пару зарядів «електрон-дірка» [2].

Нами продемонстровано деякі особливості агрегації кількох ціанінових барвників у матрицях діоксиду титану у вигляді окремих або комбінованих тонких плівок. Виявлено, що залежно від заряду матриць TiO_2 можуть утворюватися агрегати різного типу. Було показано, що за допомогою різних комбінацій барвників можна покращити оптичний відгук зразка.

[1] G. Busse, B. Frederichs, N. Kh. Petrov, S. Techert, Phys. Chem. Chem. Phys. 6, 3309 (2004).

[2] X. M. Song, Journal of Physical Chemistry C. 113, 10681 (2009).

EXTREMELY NARROW, SHARP-PEAKED RESONANCES AT THE EDGE OF THE CONTINUUM

I. Lukosiunas¹, L. Grineviciute², J. Nikitina², D. Gailevicius¹, and K. Staliunas^{1,3,4}

¹*Vilnius University, Faculty of Physics, Laser Research Center, Sauletekio Ave. 10, Vilnius, Lithuania*

²*Center for Physical Sciences and Technology, Savanoriu Ave. 231, LT-02300 Vilnius, Lithuania*

³*ICREA, Passeig Lluís Companys 23, 08010, Barcelona, Spain*

⁴*UPC, Dep. de Física, Rambla Sant Nebridi 22, 08222, Terrassa (Barcelona) Spain*
e-mail: ignas.lukosiunas@ff.vu.lt

In this work, we primarily focus on the classical phenomenon of resonance shape, its origins, and its behavior in the thin dielectric films that exhibit transverse periodicity. The resonance itself forms whenever the incident light wave excites transverse propagating modes inside the device, which back-scatters it consequently. The reflection, induced by the device, corresponds to certain resonant modes which are quantified in the semi-analytical model borrowed from linear quantum mechanics: the numerical results are shown in fig. 1 (a,b).

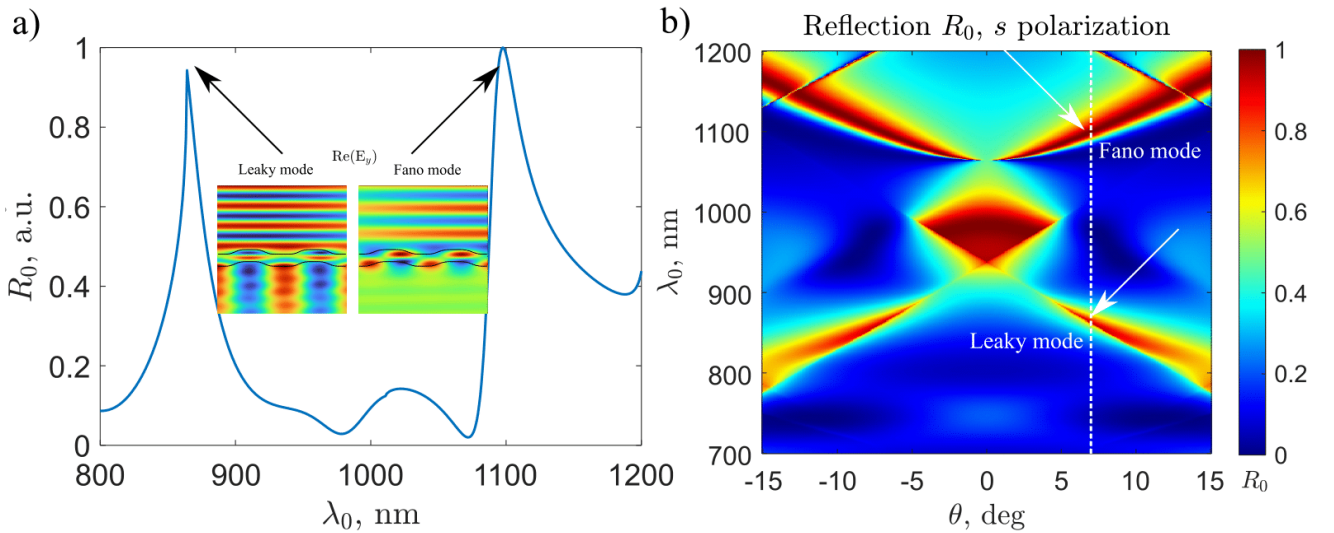


Figure 1. Guided mode resonances (a) and the spectral-angular response of a periodic waveguide (b)

The idea of the analytical model is to define the shape of the resonance which is at the top edge (i.e. substrate) of the potential well, thus bringing forth the asymmetrical shape and leaky field behavior. Such an effect is achieved once the right parameters, such as the width, depth, and coupling coefficients of the well are properly tuned to match the resonance for desired wavelengths of the beam propagating perpendicularly about the well.

The same effects are achieved for a light wave traveling across the periodic thin dielectric film device which, due to the quantum mechanism analog, couples the incident wave with a reflected one via excited wave-guide mode. Such behavior is thoroughly analyzed with Rigorous Coupled Wave Analysis [1] method and is experimentally realized via the Ion Beam Sputtering method, thus matching the simulated result. Practical applications of such resonances involve - sharp, narrow spectral beam filters, spatial light filters, polarizers, and light couplers [2-5].

- [1] M. G. Moharam, Drew A. Pommet, Eric B. Grann, and T. K. Gaylord, J. Opt. Soc. Am. A 12, 1077 (1995).
- [2] L. Grineviciute, J. Nikitina, C. Babayigit, and K. Staliunas, Applied Physics Letters. 118, 131114 (2021).
- [3] L. Grineviciute, C. Babayigit, D. Gailevicius, M. Peckus, M. Turdnev, T. Tolenis, M. Vengris, H. Kurt, and K. Staliunas, Advanced Optical Materials. 10.1002/adom.202001730 (2021).
- [4] I. Lukosiunas, L. Grineviciute, J. Nikitina, D. Gailevicius, and K. Staliunas, "Extremely Narrow, Sharp-Peaked Resonances at the Edge of the Continuum" 23 (2022).
- [5] R. Magnusson, Opt. Lett. 38, 989 (2013).

ФОТОЛЮМІНЕСЦЕНЦІЯ ВОДНОГО РОЗЧИНУ МОЛЕКУЛ ТИМІНУ

М.М. Сароз, М.І. Шафраньош, М.О. Маргітич, М.І. Суховія, Ш.Б. Молнар,
А.І. Лемко, О.О. Шпеник, І.І. Шафраньош

Ужгородський національний університет, Ужгород
e-mail: mykhailo.saroz@uzhnu.edu.ua

Дослідження фотофізичних характеристик азотистих основ нуклеїнових кислот на даний час є надзвичайно актуальним та є предметом активних досліджень [1-4]. Причинами цього є вивчення механізмів фотоіндукованого впливу на біологічні структури, а також потребами з боку новітніх біотехнологій. Внаслідок токсичного впливу ультрафіолетового випромінювання (УФ) на живі організми, важливо зрозуміти їхній ефект на молекулярному рівні - руйнування структури ДНК, РНК та їхніх складових. УФ випромінювання, поглинене нуклеїновими кислотами, може викликати каскад небезпечних фотохімічних подій і потенційно може призвести до пошкодження генетичного коду. В цьому повідомленні представляються результати досліджень люмінесценції молекул азотистої основи тиміну під дією опромінення з частотами у видимій та ультрафіолетовій області спектру.

Люмінесценція досліджувалась з використанням спектрофлуориметра RF-6000 компанії Shimadzu. Джерелом випромінювання була ксенонова лампа, яка генерувала випромінювання з довжинами хвиль від 200 нм до 900 нм. Даний спектрофлуориметр був доповнений джерелом лазерного випромінювання, промінь якого встановлювався під кутом 90° до лінії опромінення від ксенонової лампи. Нейтральний розчин тиміну був приготовлений на основі дистилату води та препарату цієї азотистої основи фірми Sigma-Aldrich (чистота 99 %).

В даній роботі отримані нові дані з фотолюмінесценції нейтральних водних розчинів тиміну при кімнатній температурі. Отримано спектр фотолюмінесценції водного розчину тиміну при кімнатній температурі, яка ініційована випромінюванням ксенонової лампи з довжиною хвилі 275 нм. Спектр люмінесценції представляє собою широку смугу з нечітко вираженим порогом при довжині хвилі 280 нм та максимумом у спектральній області 320 нм. Поведінка кривої люмінесценції практично залишається незмінною при варіації довжини хвилі збудження в інтервалі від 200 нм до 280 нм. Спостерігаються розбіжності результатів наших експериментів з даними робіт [5, 6] (водні нейтральні розчини) та [7] (плівки при температурі 77 К) .

Приведений спектр відображає лише флуоресценцію, а фосфоресценція не проявляється. Відсутність фосфоресценції може бути пояснена впливом *pH* розчинника та температури.

Фізична картина процесу фотолюмінесценції нейтрального водного розчину тиміну якісно змінюється при впливі додаткового інтенсивного електромагнітного поля (ЕМП). Такий методичний підхід для тиміну був застосований вперше.

Для створення ЕМП нами було використано джерело лазерного випромінювання з довжиною хвилі 530 нм та потужністю 0,25 Вт. Збудження водного розчину тиміну з одночасною дією випромінювання ксенонової лампи та лазерного променя приводить до якісних змін у спектрі люмінесценції. Зокрема, поріг люмінесценції дещо зміщується в короткохвильову область, а на кривій люмінесценції виникає додатковий максимум при довжині хвилі 410 нм. Ми прогнозуємо, що утворене лазером інтенсивне ЕМП сприяє утворенню збуджених синглетних станів фотодимерів тиміну, які в результаті інтеркомбінаційної конверсії (міжсистемний кросинг), помітно збільшують заселеність триплетних станів T_n . У свою чергу, ці стани, внаслідок явища внутрішньої конверсії, спричиняють додаткове заселення перших триплетних станів T_1 . Радіаційний розпад цих триплетних станів викликає фосфоресценцію, яка і є причиною появи другого максимуму в області довжин хвиль 410 нм. Таким чином, на наш погляд, має місце синергетичний вплив лазерного випромінювання на механізм трансформації енергії збуджених молекул. тиміну.

Корисним є порівняння отриманих нами даних із спектром люмінесценції газової фази тиміну, ініційованої пучком електронів, який було отримано в роботі [8]. На відміну від спектру фотолюмінесценції водного розчину тиміну спектр люмінесценції газової фази тиміну формують процеси дисоціативного збудження молекул, дисоціативного збудження з іонізацією, збудження електронних рівнів вихідної молекули та молекулярного іону. При цьому слід зазначити, що в умовах газової фази тиміну руйнування метастабільних триплетних станів практично відсутнє. Автори роботи [8] в результаті ідентифікації спектру люмінесценції дійшли висновку, що спектральні особливості в області довжин хвиль ~ 320 нм відповідають флуоресценції, а в області довжин хвиль ~ 400 нм - фосфоресценції. Такий висновок корелює з нашим тлумаченням описаної вище фізичної картини процесу фотолюмінесценції при впливі додаткового електромагнітного поля.

- [1] C. E. Crespo-Hernandez, B. Cohen, P. M. Hare, B. Kohler, Chem. Rev. 104, 4 (2004).
- [2] G. Olaso-Gonzalez, D. Roca-Sanjuan, L. Serrano-Andrés, M. Merchan, J. Chem. Phys. 125, 231102 (2006);
- [3] I. Shafranyosh, M. I. Sukhoviya, J. Chem. Phys. 137, 184303 (2012);
- [4] R. Improta, F. Santoro, L. Blancafort, J. Chem. Rev. 116, 6 (2016);
- [5] M. A. Morsy, A. M. Al-Somali, and A. Suwaiyan. J. Phys.Chim. B. 103, 11205 (1999).
- [6] S. Udenfriend, P. Zaltman. Analytical biochemistry. 3, 49 (1962).
- [7] N.Ya. Dodonova, M.N. Kiseleva. Izv. Akad. Nauk SSSR. 39, 2232 (1975).
- [8] I. Shafranyosh & M. I. Sukhoviya. Optics and Spectroscopy 102, 500 (2007).

SCALING INDEX TO MEASURE SPATIAL PATTERNS IN COMPETING DYNAMICS ISING MODEL

J. Kvedaravicius¹, A. Kononovicius²

¹*Faculty of Physics, Vilnius University, Lithuania*

²*Institute of Theoretical Physics and Astronomy, Vilnius University, Lithuania*
e-mail: justas.kvedaravicius@ff.stud.vu.lt

The well-established ideas of the Ising model from statistical physics have seen further development in the field of sociophysics. A lattice of spins and its Ising-like interactions has proven to be a fruitful framework to describe the evolution of state and exchange of opinions in human society. Recent years have seen new efforts to facilitate comparison of results from temporal opinion models to empirical or experimental data [1, 2]. Such data are usually rich in spatial diversity and accounting for the mobility dynamics can bridge the gap between the models and the data. However, there is little investigation on effects of both temporal and spatial dynamics in spin models except for a special case of the Ising model [3].

This research proposes a new scaling-based method to determine and measure what spatial patterns emerge when competing Metropolis (temporal) and Kawasaki (spatial) dynamics in the Ising model are applied. Numerical Monte Carlo simulations were performed for the competing dynamics model at various Metropolis temperatures T_M and dynamics selection parameter p . Four distinct cases of Kawasaki dynamics temperatures T_K were considered - zero ($T_K = 0$), infinite ($T_K = \infty$), critical ($T_K = T_C$) and varying temperatures ($T_K = T_M$). Spatial patterns are determined by evaluating the proposed diversity index and calculating the fractal dimension by utilizing the box-counting method. Both values are obtained by changing the scale of the model lattice. Calculation of the diversity index closely resembles the renormalization technique, instead spins of the scaled lattice represent mean values of the spins from the original lattice. For each new scale of lattice, the relative standard deviation is calculated, and a scaling curve is obtained. The usual antiferromagnetic, ferromagnetic, and paramagnetic configurations result in unique scaling curves, which allows us to get the diversity index values ranging from -1 (antiferromagnetic configuration) to 1 (ferromagnetic configuration).

Two distinct cases of competing dynamics in the ferromagnetic Ising model show profound changes in the lattice configurations based on the values of the scaling measures. Cases for zero and infinite Kawasaki temperatures lead to change of the phase transition temperature. Zero temperature Kawasaki dynamics allows only energy reducing Monte Carlo steps and leads to the formation of fractal structures in the ferromagnetic temperature range as seen in Fig. 1. Whereas infinite temperature

Kawasaki allows only energy increasing MC steps and antiferromagnetic ordering emerges for sufficiently small p .

Setting Kawasaki dynamics temperature equal to that of Metropolis results in Metropolis-type spatial patterns. The diversity index in this case reaches its peak value at the critical temperature point even though the ferromagnetic temperature range should show the highest index values. This result is due to the inaccuracy of the index with order parameter close to the extreme values. Fractal dimension also differs from the usual topological dimension at the critical point confirming scale invariance. Paramagnetic temperature ranges exhibit non-integer fractal dimension due to the selected small boxes scaling range (see Fig. 1). Critical Kawasaki temperature case only strengthens domain separation at critical temperature value.

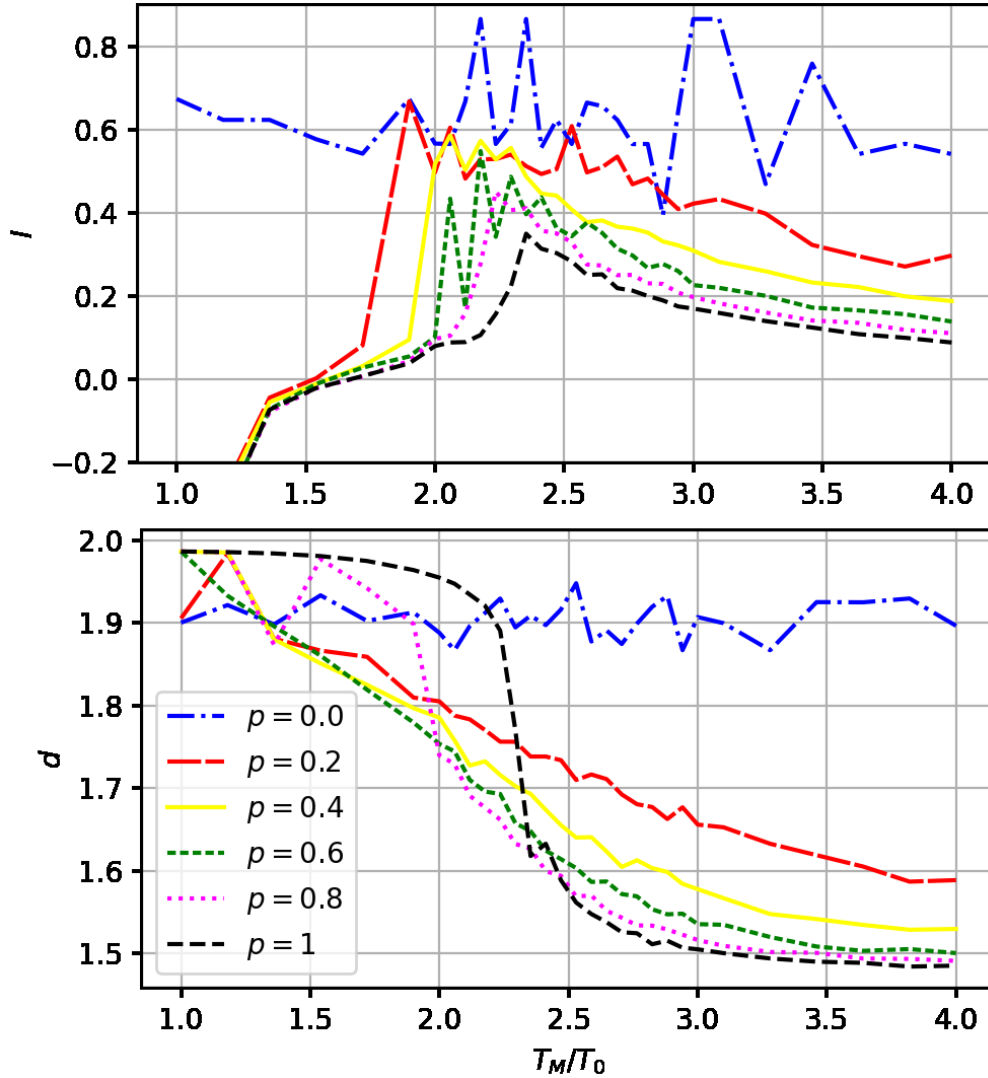


Figure 1. Diversity index (top) and fractal dimension (bottom) values for competing Metropolis-Kawasaki dynamics in Ising model.

The case of global Kawasaki dynamics with $T_K = 0$ is shown. Different curves represent the different dynamics selection parameter p values, where $p = 1$ corresponds to pure Metropolis dynamics and $p = 0$ to pure Kawasaki dynamics. Calculations were made for 64×64 lattice with 10^5 MC steps for equilibration, fractal dimension was calculated for boxes covering from 1 up to 16 spins.

In conclusion, the non-trivial results of zero or infinite Kawasaki temperature in competing dynamics match those reviewed in [3] and referenced therein. In terms of spatial diversity, scaling methods prove relevant in capturing spatial patterns and scale invariances so abundant in Ising type models. Yet the quality of measurement depends on the relative sizes of different spin value populations.

- [1] J. Fernandez-Gracia, K. Suchecki, J. J. Ramasco, M. Miguel, V. Eguiluz, Physical Review Letters 112, 158701 (2014).
- [2] A. Kononovicius, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment 2019, 103402 (2019).
- [3] S. Artz, S. Trimper, International Journal of Modern Physics B. 23, 151 (1998).

МАНІПУЛЮВАННЯ ПОКАЗНИКОМ ЗАЛОМЛЕННЯ ТОНКИХ ПЛІВОК ТРИ-(8-ГІДРОКСИХІНОЛІН) АЛЮМІНІЮ, ДИЦІАНОМЕТИЛЕНПІРАНУ ТА ЙОГО ПОХІДНИХ

В. Васільєв¹, Б. Турко¹, І. Карбовник¹, А. Коструба², О. Кушнір¹

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів

²Львівський національний університет ветеринарної медицини та біотехнологій
імені Степана Гжицького, Львів
e-mail: Vladyslav.Vasilyev@lnu.edu.ua

До беззаперечних переваг органічних матеріалів, зазвичай, зараховують дешевизну, пластичність, високу ефективність і варіативність методів синтезу. Одними з найбільш широко досліджуваних органічних сполук є три-(8-гідроксихінолін) алюмінію (Alq_3), диціанометилєнпіран (DCM) та його похідні. Цікавість до цих структур обумовлена надзвичайно широким спектром їхнього практичного застосування – вони використовуються як компоненти активних середовищ лазерів, органічних світлодіодів (OLED), сенсорів (вибухових речовин, зокрема), логічних вентилів, сенсоризованих барвниками сонячних елементів тощо. Як відомо, в OLED-пристроях лише невелика частина згенерованого світла виходить назовні [1]. Виявилося, що підвищити приблизно на 30 % квантову ефективність OLED можна зменшенням величини показників заломлення тонкоплівкових шарів у OLED [1]. Автори [1, 2] використали метод осадження під гострим кутом (oblique angle deposition) для зменшення величини показника заломлення тонких плівок Alq_3 .

Тонкі плівки DCM, DCM-5, DCM-18, Alq_3 :DCM (10 ваг. % DCM) та Alq_3 :DCM-5 (10 ваг. % DCM-5) було отримано методом термічного вакуумного випаровування на скляних підкладках, розміщених перпендикулярно та під кутом 10° до потоку пари осаджуваної речовини. За результати еліпсометричних досліджень цих плівок встановлено, що використанням методу осадження плівок DCM, DCM-5, DCM-18, Alq_3 :DCM (10 ваг. % DCM) та Alq_3 :DCM-5 (10 ваг. % DCM-5) під гострим кутом можна маніпулювати величинами їхніх показників заломлення на довжині хвилі світла $\lambda = 632,8$ нм в межах від $\Delta n \approx 0,05$ до $\Delta n \approx 0,18$. Отримані результати будуть корисними при оптимізації та конструюванні з досліджуваних тонких плівок високоефективних органічних світлодіодів.

Ця дослідницька робота була підтримана Національним фондом досліджень України, 2020.02/0217 «Світлогенеруючі низькорозмірні структури з поляризованою люмінесценцією на основі органічних і неорганічних матеріалів».

[1] A. Salehi, Y. Chen, X. Fu, C. Peng, F. So, ACS Appl. Mater. Interfaces 10, 9595 (2018).

[2] B. Szeto, P.C.P. Hruday, J. Gospodyn, J.C. Sit, M.J. Brett, J. Opt. A Pure Appl. Opt. 9, 457 (2007).

INVESTIGATION OF ASPIRIN, PARACETAMOL AND IBUPROFEN BY PHOTOEMISSION SPECTROSCOPY AND THEORETICAL CALCULATIONS

H. Sa'adeh^{1,2}, K.C. Prince^{2,3}, R. Richter², V. Vasilyev⁴, D.P. Chong⁵, F. Wang³

¹*Department of Physics, The University of Jordan, Amman 11942, Jordan*

²*Elettra Sincrotrone Trieste, Area Science Park, Basovizza, Trieste, Italy*

³*Department of Chemistry and Biotechnology, School of Science, Computing and Engineering Technologies, Swinburne University of Technology, Melbourne, Victoria 3122, Australia*

⁴*National Computational Infrastructure, Australian National University, Canberra, ACT 0200, Australia*

⁵*Department of Chemistry, University of British Columbia, Canada
e-mail: hanan.saadeh@ju.edu.jo*

Synchrotron-based spectroscopic techniques represent a unique tool in the study of isolated molecular species of biological and/or pharmacological interest. Knowledge of the electronic structure of these molecules is of fundamental importance for understanding their functioning and possible malfunctioning. Valence photoemission spectroscopy (PES) and core X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) are classic but reliable synchrotron radiation tools for studying the electronic structure of molecules in the gas phase, by producing neat and sharp experimental data to be compared with quantum mechanical calculations. XPS probes the chemical state of the molecule because the binding energy shifts depend on the chemical environment of the atom that is ionized, while valence band (VB) spectra provide complementary information about the valence states.

We have investigated the electronic structure of three essential, commonly used medications: aspirin ($C_9H_8O_4$), paracetamol ($C_8H_9NO_2$), and ibuprofen ($C_{13}H_{18}O_2$) [1]. Valence band and core level photoelectron spectra (see, e.g., Figure 1) were measured at the GasPhase (GAPH) Photoemission beamline of Elettra-Sincrotrone Trieste, Italy. Quantum chemical calculations were carried out using the outer valence Green function (OVGF) model for the valence bands and core electron binding energy (CEBE) model for the core levels [2]. Although the three compounds share a benzene ring, and they also have a number of other chromophores in common, their spectroscopic data indicate chemical diversity, suggesting that their modes of bonding under physiological conditions are likely to be diverse.

To the best of our knowledge, there have been no reports of the valence photoelectron spectrum of aspirin, nor of the core photoelectron spectra of any of these three compounds. The obtained results and their interpretation in the light of quantum chemical calculations will be presented.

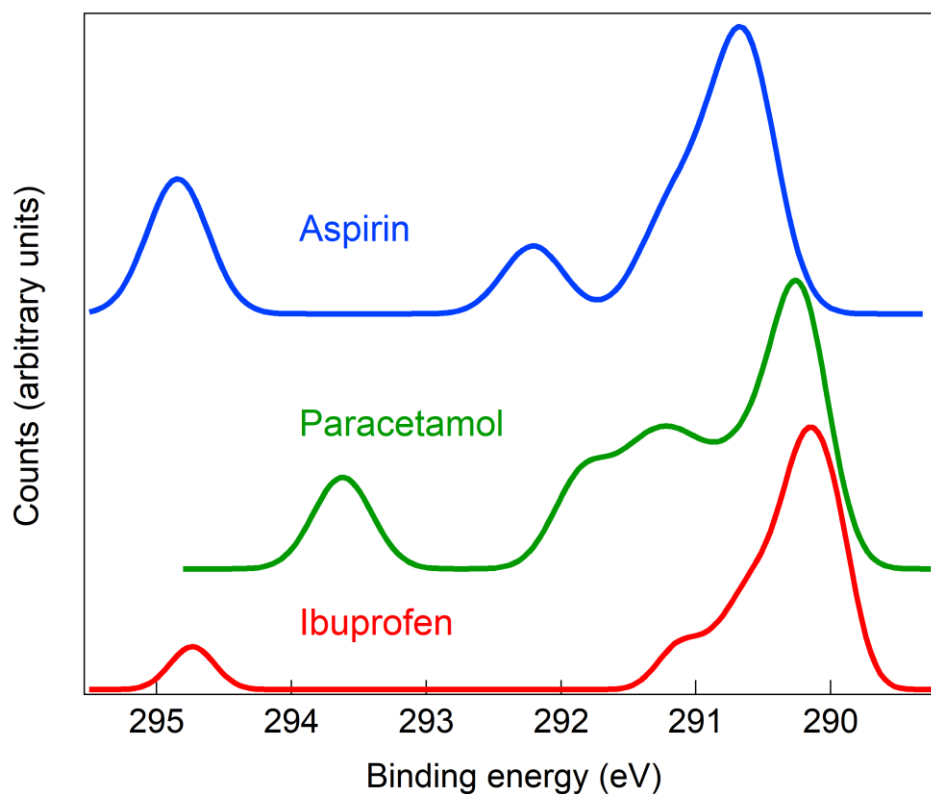


Figure 3: C1s spectra of the investigated molecules [1].

- [1] H. Sa'adeh, K.C. Prince, R. Richter, V. Vasilyev, D.P. Chong, F. Wang, Phys. Chem. Chem. Phys. Accepted Manuscript (2023).
[2] D.P. Chong, Canadian J. Chem. 74, 1005 (1996).

PHASE DIAGRAMS OF HOMOCYCLIC HYDROCARBONS

V.V. Sagan, V.A. Konstantinov, A.V. Karachevtseva

B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the National Academy of Sciences of Ukraine, 47 Nauky Ave., Kharkiv 61103, Ukraine
e-mail: sagan@ilt.kharkov.ua

A phase diagram is a graphical representation of the equilibrium states of a substance as a function of temperature, pressure and volume. There are stable phases, which exist for an unlimited time, and metastable phases, the lifetime of which is limited. The cyclic hydrocarbons considered here, quite often form a metastable phases. The regions of coexistence of two phases are limited by curves, at any point of which the temperature and pressure allow the two phases to exist in equilibrium. At normal atmospheric pressure, the transitions between solid-solid, solid-liquid and gas-liquid phases can be considered as points on the temperature scale, characteristic for each substance. If the pressure varies, it leads to changes of the phase transition temperature. The «triple point» is the point at which the liquid, solid, and vapor phases can exist together. On P-V or V-T diagrams, these triple-phase states form a line called the triple line. V-T diagrams allow you to visually observe the position of phase boundaries in isochoric studies of thermal properties, such as thermal conductivity, heat capacity, dielectric properties, etc.

Carbon has the unique ability to form a huge variety of stable cyclic structures. A cyclic compound (or ring compound) is a term for a compound in which one or more series of atoms in the compound is connected to form a ring. Cyclic compounds can be homocyclic and heterocyclic. Homocyclic compounds contain atoms in the cycle only one chemical element. If these are carbon atoms, then such compounds are called carbocyclic. If there are atoms of different elements in the cycle, then such compounds called heterocyclic. Here we have considered such homocyclic structures as benzene, cyclohexane, cyclohexene, and cyclopentane.

There are separate data on phase P-T diagrams of cyclic hydrocarbons, while V-T diagrams are practically not studied. We tried to make up for this shortcoming using both literary and our own experimental data, obtained during the study of isochoric thermal conductivity at different molar volumes and thermal pressure of a number of cyclic compounds [1-3]. The technique of the conducted studies made it possible to work in a limited temperature range near melting; therefore, in this paper, we mainly discuss the high-temperature stable phases of these compounds. All studies of thermal conductivity were carried out on the setup, using the method of stationary heat flow in a cell of coaxial geometry. The setup, samples growing procedure and experimentation is described in detail in [4]. After the end of measurements, the samples were recondensed into a thin-walled vessel, and the sample masses were determined by weighing. Molar volumes of samples were calculated from the known volume of the measuring cell and the mass of samples. The accuracy of determination of molar volumes was no worse than $\pm 0.2\%$ and $\pm 2\%$ for pressure. The temperatures T_0 of the beginning of the fulfillment of the condition $V=\text{const}$ in the experiment and the temperatures T_m of the beginning of melting

of the samples were determined from the characteristic kinks in the thermal conductivity curve.

Phase P-T and V-T diagrams of solid homocyclic hydrocarbons: benzene (C₆H₆), cyclopentane (C₅H₁₀) were constructed using both literature and our own experimental data obtained during the study of isochoric thermal conductivity in high temperature phases. The V-T phase diagrams of cyclohexane (C₆H₁₂) presented earlier, was refined and supplemented with P-T diagrams. The possibility of constructing a phase diagram for cyclohexene (C₆H₁₀) is also discussed. The changes in molar volume during melting and the boundaries of the existence of high temperature phases have been determined. The magnitudes of thermal pressure in high-temperature phases are obtained. Experimental values of dP_m/dT on melting line were compared with those calculated by the Clapeyron-Clausius equation:

$$dP_m/dT = \Delta S_m / \Delta V_m$$

Good agreement between experimental and calculated data is observed. The magnitude of thermal pressure $(dP/dT)_v$ vary from 0.8 to 3.6 MPa/K for cyclic hydrocarbons discussed and their values correlate in a certain way with the values of dP_m/dT on the melting line.

Table 1

Compound	T _m , K	ΔS _m , J/mol× K	ΔV _m , cm ³ /m ol	(dP/dT) _v , MPa/K	(dP _m /dT) _{mea} s, MPa/K	(dP _m /dT) _{ca} l, MPa/K	(dP _m /dT) _v (dP/dT) v
C ₆ H ₆	278.5	35.4	10.35	2.5	3.76	3.8	1.6
C ₆ H ₁₂	278.8	9.48	4.4	0.82	2.0	2.15	2.6
C ₅ H ₁₀	179.7	3.4	1.4	1.4	3.6	3.6	2.4

Table 1: T_m are the melting points of the corresponding cyclic hydrocarbons at saturated vapor pressures, ΔS_m and ΔV_m are the entropy and molar volume changes during melting, $(dP/dT)_v$ are the derivatives of thermal pressure with respect to temperature, dP_m/dT are derivatives of pressure with respect to temperature along the melting curve both experimental and calculated by the Clapeyron-Clausius equation, attitude of dP_m/dT to $(dP/dT)_v$.

- [1] V.A. Konstantinov, V.P. Revyakin, V.V. Sagan, O.I. Pursky, and V.M. Sysoev, J. Exp. Theor. Phys. 139, 220 (2011).
- [2] V.A. Konstantinov, A.I. Krivchikov, O.A. Korolyuk, V.P. Revyakin, V.V. Sagan, G.A. Vdovichenko, and A.V. Zvonaryova, Physica B, 424, 54 (2013).
- [3] V.A. Konstantinov, V.P. Revyakin, V.V. Sagan, V.P. Revyakin, O.I. Pursky, Cent. Eur. J. Phys. 12(9), 654 (2014).
- [4] V. A. Konstantinov, S. A. Smirnov, and V. P. Revyakin, Instr. Eksp. Tech. 42(1), 133 (1999).

Acknowledgments

This work was supported by the National Research Foundation of Ukraine (Grant № 2020.02/0094).

РОЗРАХУНКИ СТРУКТУРИ АТОМА V ТА ІОНА V⁺

А.А. Кочемба, В.Ю. Лазур, С.В. Гедеон

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

Елементи групи заліза становлять значний інтерес при вивченні як астрофізичної, так і лабораторної плазми, і важливим є визначення їх властивостей, зокрема швидкостей переходу між низько розташованими станами [1]. Для створення моделей Сонця та інших астрономічних об'єктів необхідні детальні знання атомних спектрів [2]. Спектральна інформація використовується для визначення відносної кількості різних елементів, моделювання енергетичного балансу у фотосфері та визначення відносного руху зірок. Спектр ванадію дуже корисний у таких дослідженнях через відносно велику кількість цього елемента у фотосфері та значну кількість спостережуваних ліній. Крім того, сплави ванадію вивчаються для використання як конструкційного матеріалу для покриттів у термоядерних реакторах [3].

Існує також інтерес до дослідження непружних зіткнень електронів з атомами ванадію та визначення ефективних перерізів цих процесів. В той же час, наявні теоретичні роботи здебільшого присвячені дослідженню надтонкої структури атома ванадію. Зокрема, масштабний розрахунок хвильових функцій [4] проведено у рамках нерелятивістського багатоконфігураційного наближення Хартрі-Фока (БКХФ). Проте розклад сильного зв'язку у цьому дослідженні включав аж до 30000 конфігураційних станів, що через технічні обмеження фактично унеможливило використання таких хвильових функцій у подальших розрахунках розсіяння.

Тому метою даної роботи є отримання хвильових функцій нейтрального атома ванадію та його іона, придатних для подальших розрахунків перерізів зіткнення електронів з цими атомними системами.

Одним із найбільш ефективних підходів для подібних розрахунків є використання БСР-версії R-матричного методу (БСР, B-spline R-matrix (BSR)) [5] у комбінації з методом БКХФ [6]. Метод БСР дозволяє не тільки проводити розрахунки розсіяння, але, з накладанням граничних умов, і розрахунки зв'язаних станів. Детальніше з самим методом і прикладами його застосування можна ознайомитись у наших працях [7-10].

Відмінною особливістю методу БСР є можливість використання залежних від терму неортогональних орбіталей. Це дозволяє незалежно оптимізувати окремі атомні хвильові функції і таким чином генерувати більш точний опис станів мішені. Його переваги особливо помітні у випадках розсіювання електронів на системах зі складною конфігураційною структурою, включаючи множинні відкриті оболонки [10].

Атом ванадію ($Z=23$, $[\text{Ar}]3d^34s^2$) є відносно важким елементом, тому релятивістські ефекти очікувано мають бути відчутними, проте, як було показано в [1] і [4], адекватного опису атомної структури можна досягти і в

нерелятивістському LS -наближенні. Тому в рамках БСР-підходу, для розрахунку зв'язаних станів атома ванадію структура багатоканального розкладу мішені була вибрана у вигляді

$$\Phi(3d^3 nl n'l', LS) = \sum_{nl, L'S'} \{ \phi(3d^4, L'S') P(nl) \}^{LS} + \sum_{nl, L'S'} \{ \phi(3d^3 4s, L'S') P(nl) \}^{LS} + a \phi(3d^3 4s^2)^4 F \quad (1)$$

Тут $P(nl)$ позначає хвильові функції зовнішнього валентного електрона, тоді як ϕ і φ позначають конфігураційні розклади зазначених станів іона та атома відповідно. Дані розклади були згенеровані в окремих БКХФ-розрахунках для кожного з станів.

Так, розклади станів $3d^4 LS$ та $3d^3 4s LS$ іона ванадію включають усі одинарні та подвійні збудження з орбіталей $3d$ та $4s$ до кореляційних орбіталей $4l$ та $5l$ ($l = 0-4$), які знову ж таки отримані з окремих БКХФ-розрахунків. Загалом було отримано хвильові функції для 15 нижніх станів іона ванадію з конфігураціями $3d^4$ (терми $^1S, ^3P, ^3,5D, ^3F, ^1,3G, ^3H, ^1I$) та $3d^3 4s$ (терми $^3,5P, ^3,5F, ^1,3G$). Узгодження енергій збудження для даних рівнів з відповідними значеннями NIST [11] (середнє зважене за рівнями тонкої структури) є задовільним і складає в середньому 0.4 еВ. Було показано, що врахування валентних кореляцій шляхом включення у розклад наборів орбіталей $6l$ та $7l$ ($l = 0-5$) дозволяє покращити значення енергій, проте значно збільшує кількість конфігурацій у розкладі. Також, з метою збереження прийняттого розміру кінцевих розкладів для атомних станів, було знехтувано усіма іонними внесками з коефіцієнтами розкладу менше 0.01.

Окремо було розраховано хвильові функції для 8 нижніх станів атома ванадію з конфігураціями $3d^3 4s^2$ (терми $^2,4P, ^2D, ^4F, ^2G, ^2H$) та $3d^4 4s$ (терми 4,6D). Відхилення по енергії від рекомендованих NIST [11] значень становить в середньому 0.2 еВ. Отримані хвильові функції можуть бути використані як для покращення атомних станів в подальших БСР-розрахунках зв'язаних станів (1), так і в окремих розрахунках розсіяння електронів на атомах ванадію з використанням методу БСР.

- [1] T.M. Luke, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30, 4223 (1997).
- [2] U. Heiter et al, Phys. Scr. 90, 054010 (2015).
- [3] T. Muroga, Materials Transactions 46, 405 (2005).
- [4] O. Scharf, G. Gaigalas, Central European Journal of Physics 4, 42 (2006).
- [5] O. Zatsarinny, Comput. Phys. Commun. 174, 273 (2006).
- [6] O. Zatsarinny and C. Froese Fischer, Comput. Phys. Commun. 180, 2041 (2009).
- [7] V.F. Gedeon et al, Ukr. J. Phys., 67(3), 161 (2022).
- [8] V.F. Gedeon et al, J. Phys. Stud, 26(1), 1301 (2022).
- [9] O. Zatsarinny et al, Phys. Rev. A 74, 052708 (2006).
- [10] V. Gedeon et al, Phys. Rev. A 89, 052713 (2014).
- [11] Kramida, A., Ralchenko, Yu., Reader, J., and NIST ASD Team (2022). NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.10). Available: <https://physics.nist.gov/asd>

**АПАРАТНІ МОЖЛИВОСТІ ОБЛАДНАННЯ ФІРМИ
«Mirion (Canberra) Technologies, Inc.» ДЛЯ РАДІАЦІЙНОГО МОНІТОРИНГУ
ОБ'ЄКТІВ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА**

С.В. Самочерних
*Товариство з обмеженою відповідальністю «Канберра Паккард»
03037, м Київ, вул. Братів Зерових 14-б, кв. 3
тел/факс (044) 249-63-17*

e-mail: cpua@cpse.net

У зв'язку з широким використанням у промисловості та енергетиці України радіаційних речовин існує небезпека забруднення окремих територій радіонуклідами. Джерелами радіації є ядерні енергетичні та дослідницькі установки, випробування ядерної зброї, відходи уранових шахт та підприємств ядерного паливного циклу. Потенційними джерелами радіаційного забруднення можуть стати аварії на ядерних установках та сховищах радіоактивних відходів. В умовах значної кількості екологічних проблем різного рівня складності та вкрай обмежених ресурсів, доступних для їх вирішення, гарантування екологічної безпеки ядерних об'єктів і радіаційного захисту населення та довкілля, зведення до мінімуму шкідливого впливу наслідків аварії на Чорнобильській АЕС віднесено до національних пріоритетів охорони навколишнього природного середовища і раціонального використання природних ресурсів [1]. Тому проведення оцінки радіаційного стану окремих територій є надзвичайно актуальним.

Радіаційний контроль об'єктів навколишнього середовища є вихідним профілактичним і захисним заходом, на базі результатів якого формується і приймається до виконання вся система наступних заходів, що забезпечують зниження рівня опромінення як учасників проведення робіт, так і населення. Ефективність радіаційного контролю залежить від швидкості та достовірності одержуваної інформації, а також від ступеня повноти його проведення.

Аналіз сучасного стану розробок приладів радіаційного контролю показав, що в даний час ринок цих приладів переживає період розвитку. Як технічні характеристики, так і конструктивні рішення приладів лежать в дуже широкому діапазоні.

Для проведення якісного радіаційного моніторингу об'єктів довкілля в останні роки широко використовується обладнання фірми Міріон. Це, в першу чергу, детектори гамма-випромінювання з надчистого германію і багатоканальні аналізатори імпульсів, альфа-спектрометри, альфа-бета радіометри, вимірювачі потужності дози гамма-випромінювання для екологічного моніторингу, монітори

повітряного середовища, портативні гамма-спектрометри та дозиметричні і радіометричні прилади [2].

Як приклад розглядається гамма-спектрометричний комплекс на базі детектора з надчистого германію BE3830P багатоканального аналізатору імпульсів LYNX та програмного забезпечення Genie 2K з опцією ISOCS.

Детектор BE3830P має активну площину 3800 кв.мм з товщиною 30 мм. Роздільні здатності:

≤ 0.45 кеВ для енергії 5.9 кеВ
 ≤ 0.72 кеВ для енергії 122 кеВ
 ≤ 1.8 кеВ для енергії 1332 кеВ.

Багатоканальний аналізатор імпульсів LYNX є цифровим сигнальним процесором з 32К пам'яті, вбудованим джерелом високої напруги (з трьома діапазонами для різних типів детекторів), АЦП, Ethernet та USB інтерфейси та вбудований веб-сервер.

Програмне забезпечення Genie 2K керує усіма параметрами електроніки, обробляє спектри та створює протоколи результатів вимірювань. Опція ISOCS дозволяє відкалібрувати кожний окремий детектор з ефективності реєстрації гамма-квантів і проводити вимірювання абсолютної активності зразків різної геометрії без використання калібрувальних радіоактивних джерел.

Таким чином, цей гамма-спектрометричний комплекс є універсальним інструментом визначення концентрації радіонуклідів у будь-яких об'єктах навколишнього середовища. Комплекс має варіант мобільного виконання зі спеціальним модульним захистом, візком та лазерним вимірювачем відстані.

[1] Посилання на інформацію про обладнання фірми Mirion: www.mirion.com

ІОНІЗАЦІЯ МОЛЕКУЛ ГЛУТАМІНУ ТА ГЛУТАМІНОВОЇ КИСЛОТИ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРМ

О.В. Васильєв¹, Ш.Ш. Демеш², А.І. Булгакова¹

¹Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород

²Institute for Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen, Hungary

e-mail: vasyliev.oleksandr.1996@gmail.com

Амінокислоти - важливі органічні сполуки, які входять до структурних блоків білків, містять амінну ($-\text{NH}_2$) та карбоксильну ($-\text{COOH}$) групи [1]. Глутамін (Gln) та глутамінова кислота (Glu-Acid) належать до групи замінних амінокислот і відіграють важливу роль в організмі.

Мас-спектрометричним методом [2] досліджено повні перерізи іонізації (ППІ) молекул Gln й Glu-Acid у відносних одиницях в інтервалі енергій 5-60 еВ. По порогових ділянках цих перерізів визначено енергії появи іонів-фрагментів та потенціали іонізації молекул Gln й Glu-Acid. У припороговій області енергій, виміряні перерізи відповідають процесу прямої іонізації материнських молекул, у області 15-60 еВ є внесок від процесів дисоціативної іонізації та інших (наприклад, іонізації зі збудженням, двократною іонізації). Отримані ППІ досить різко зростають від порогу до ~20 еВ. ППІ мають особливості при енергіях (у еВ): для Gln – при 14-14,5; 19-19,5 та для Glu-Acid – при 14,2-14,7; 20,2-21,2; 29,2-30,2, які відповідають появі молекулярних іонів-фрагментів.

Проведено теоретичні розрахунки потенціалів іонізації $I(M)$ молекул Gln й Glu-Acid. Їх, для трьох форм (D, DL, L) молекул, розраховано за програмою [3] з використанням *ab initio* підходів – теорії функціоналу густини (ТФГ) і Хартрі-Фока (ХФ) – у двох наближеннях. Стани молекул та їх іонів відповідали розрахованим рівноважним відстаням між атомами. У 1-му, адіабатичному наближенні, $I(M) = E_t[M^+] - E_t[M]$, де $E_t[M^+]$, $E_t[M]$ повні енергії основних станів материнського іона та нейтральної молекули. У 2-му наближенні $I(M) = -E_b^{\text{НОМО}}(M)$, де $E_b^{\text{НОМО}}(M)$ енергія зв'язку електрона на вищій зайнятій (НОМО) молекулярній орбіталі (МО). Енергія зв'язку на LUMO-орбіталі дає оцінку енергії спорідненості молекули до електрона.

Сумарні, за врахованими МО, перерізи однократної іонізації D-форм молекул, оцінено за Binary-Encounter-Bethe (БЕВ) моделлю [4] і за наближенням Гризінського [5], з використанням характеристик МО-ТФГ та ХФ. Нормування експериментальних ППІ у порозі – 8,5 еВ (Gln) і 9,0 еВ (Glu-Acid) – на БЕВ-ТФГ розрахунок дозволило отримати абсолютні значення.

Оцінено відносний внесок $P(E) = [\sigma_{k_{\text{HOMO}}}(E) / \sum_{k=k_{\text{HOMO}}}^{k_{\text{HOMO}}-n+1} \sigma_k(E)] \cdot 100\%$, від перерізу однократної іонізації НОМО орбіталі молекул у сумарний переріз. Тут $k_{\text{HOMO}} = 39$ і k, n – номер та кількість МО, врахованих у сумарному перерізі іонізації при даній енергії. Оцінку зроблено у ВЕВ моделі з МО-ТФГ (див. рис. 1). Внесок від НОМО є визначальним при початкових енергіях.

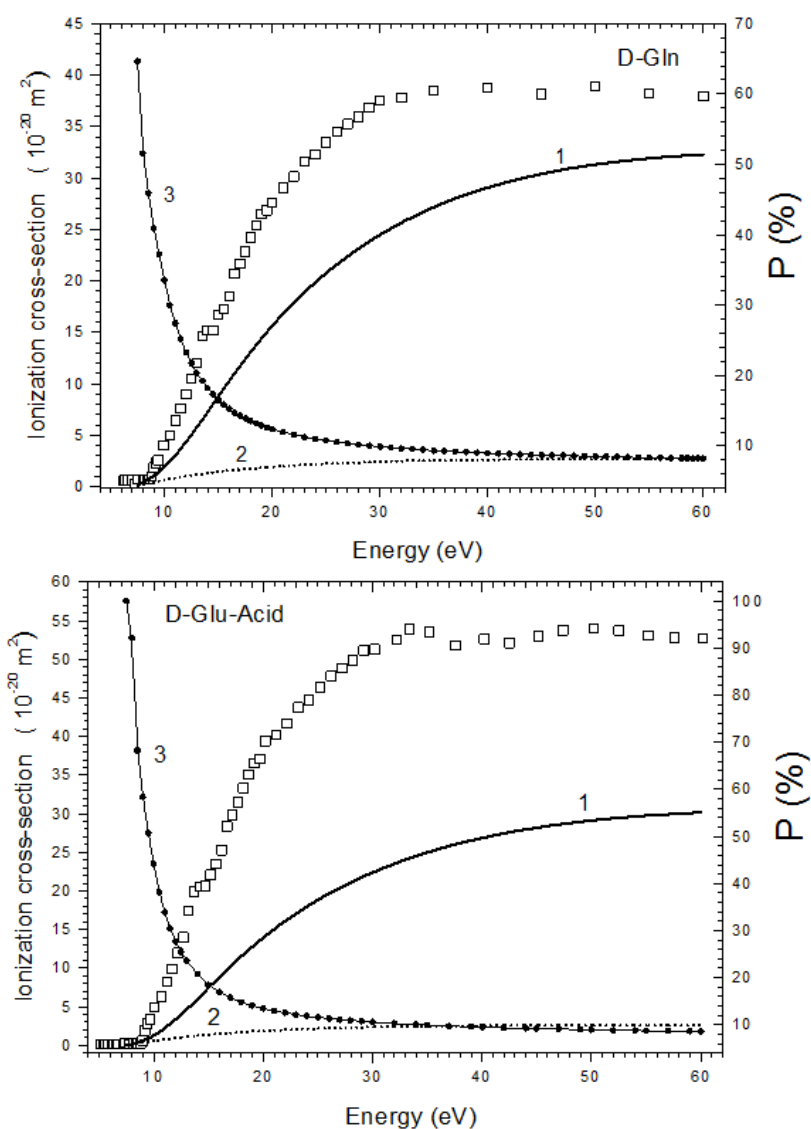


Рис. 1. Перерізи іонізації D-форм молекул Gln і Glu-Acid. $\square$ - експеримент. Розраховані методом ВЕВ-ТФГ: 1 – сумарні та 2 – НОМО; 3 - відносні внески у сумарний переріз однократної іонізації від НОМО молекулярних орбіталей.

- [1] Léon Sanche/Radiation Physics and Chemistry V. 128. P. 36-43 (2016).
- [2] A.M. Zavilopulo, A.I. Bulhakova, S.S. Demes, E.Yu. Remeta, A.V. Vasiliev. Eur. Phys. J. D. Vol.75. P.287 (2021).
- [3] M.J. Frisch et al. Gaussian 09, Revision E.01 (Gaussian Inc., 2009).
- [4] K. Yong-Kim, M.E. Rudd. Phys. Rev. A 50, 3954 (1994).
- [5] M. Gryzinski. Phys. Rev. Vol.138, A336 (1965)

DISCOVERY OF POLARIZATION DEGREE OF FREEDOM FOR LOCALIZED LIGHT

O. Yermakov¹, S. Polevoy²

¹*V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine*

²*O. Ya. Usikov Institute for Radiophysics and Electronics NAS of Ukraine, Kharkiv, Ukraine*

e-mail: oe.yermakov@gmail.com

The spectrum of electromagnetic plane waves in any isotropic homogeneous medium is twice degenerate with respect to polarization at any frequency and in any direction, because the dispersions of TE- and TM-polarized eigenmodes are absolutely the same. The operational principle of any bulk classical polarizer is based on the removal of the polarization degeneracy by using an anisotropic slab.

Miniaturization and planar technologies lead to the high localization of the electromagnetic signal in the plane of propagation. However, at the same time, the degeneracy is removed. The simplest example is the dielectric slab waveguide demonstrating the propagation of highly localized guided modes with different dispersions of TE and TM modes. So, there is no polarization degree of freedom for planar photonic devices with in-plane electromagnetic wave propagation, since the TE and TM localized modes are not degenerate. It significantly limits the functionality of flat optical and planar photonic devices. In particular, the polarizer of guided waves cannot be implemented without the broadband TE-TM polarization degeneracy.

In this work, we show the possible resolution of this fundamental problem via the nanostructuring of the dielectric slab. We aim at merging the polarization degeneracy and high localization for guided waves propagating within an all-dielectric metasurface. Namely, we theoretically study the periodic subwavelength array of cylinders with high refractive index and demonstrate the broadband TE-TM polarization degeneracy of its guided modes [1]. This concept can be transferred to the optical and infrared ranges using other material platforms and opens new opportunities for the polarization control of guided waves such as metasurface-based waveguide polarizer [2].

Another possible implementation includes the self-complementary metasurfaces obeying Babinet's duality principle [3]. In this case, we excite independently the TE- and TM-polarized surface waves at self-complementary metasurfaces. Then, by adjusting the complex amplitudes of TE and TM eigenmodes, we demonstrate the excitation of surface waves of linear, circular and arbitrary elliptical polarization [4].

These results could potentially become a platform for new generation of planar photonic polarization devices.

This work was supported in part by the National Academy of Science of Ukraine (project “All-dielectric metasurfaces with polarization-degenerate spectrum for high-precision angle-resolved chiral sensing”, Agreement 05/01-2023(4) on 02.01.2023), and in part by the Ministry of Education and Science of Ukraine under grant #0122U001482.

- [1] O. Yermakov and S. Polevoy, 2022 IEEE 12th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP), 1-4 (2022).
- [2] O. Y. Yermakov, A. A. Bogdanov, and A. V. Lavrinenko, IEEE J. Sel. Top. Quant. Electron., 25, 3 (2019).
- [3] O. Yermakov, V. Lenets, A. Sayanskiy, J. Baena, E. Martini, S. Glybovski, and S. Maci, Phys. Rev. X, 11, 031038 (2021).
- [4] S. Polevoy, and O. Yermakov, arXiv:2301.07195 (2023).

ANTI-/ PROOXIDANT AND ROS-SENSING PROPERTIES OF RE³⁺-DOPED COLLOIDAL CERIA NANOCRYSTALS DETECTED BY SPECTROSCOPIC TECHNIQUES

V. Seminko, P. Maksimchuk, V. Klochkov, S. Yefimova

*Institute for Scintillation Materials, National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkiv, Ukraine.
e-mail: seminko@ukr.net*

Nanoceria (CeO_{2-x}) is well-known for its enzyme-like antioxidant activity determined by Ce³⁺ ↔ Ce⁴⁺ redox cycles on the surface of nanoparticle during interaction with reactive oxygen species (ROS). We show the crucial role of the surface defect structure in the mechanisms of interaction of RE³⁺ (RE = Y, Eu, Tb) - doped nanoceria with hydrogen peroxide (HP) and hydroxyl radicals (•OH). Both catalase-like (for CeO₂:Tb³⁺) and Fenton-like (for CeO₂:Y³⁺ and CeO₂:Eu³⁺) HP decomposition was observed for RE³⁺-doped ceria nanoparticles leading to antioxidant or prooxidant activity, respectively.

Besides redox activity, obtained nanoparticles can be used for sensing ROS (first of all, HP) in water solutions and living cells. Reversible quenching of Eu³⁺ (590 nm), Tb³⁺ (545 nm) and Ce³⁺ (430 nm) luminescence at HP addition provide Eu³⁺-doped (CeO_{2-x}:Eu³⁺), Tb³⁺-doped (CeO_{2-x}:Tb³⁺), and undoped (CeO_{2-x}) colloidal nanoparticles by ability to detect HP concentrations in water solutions. The dynamics of Eu³⁺/ Tb³⁺/ Ce³⁺ luminescence quenching and recovery during HP-nanoceria interaction provides an insight into the microscopic mechanisms of HP sensing by CeO_{2-x}, CeO_{2-x}:Eu³⁺ and CeO_{2-x}:Tb³⁺ nanoparticles. These luminescent sensors are reversible and their recovery rates can be sufficiently increased by temperature and continuous UV irradiation. Generally, the ceria-based NPs as a new type of redox-active nanoparticles with ability both to scavenge/produce reactive oxygen species and to visualize the change in ROS concentration during this process are promising for a number of applications, while controlling the processes of recovery of undoped and doped nanoceria HP luminescence sensors provides an additional advance over traditional sensors based on organic molecules or enzymes.

ЗМІЩЕННЯ КУТА БРЮСТЕРА ЗА ДОПОМОГОЮ ДВОВИМІРНИХ МАТЕРІАЛІВ ТА СТРУКТУР

О. Маньковська¹, О. Є. Єрмаков²

¹*Білицький ліцей № 1, смт Білики, Полтавська область, Україна*

²*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків, Україна*
e-mail: oksana.mmankovska@gmail.com

Під кутом Брюстера немає відбиття ТМ-поляризованої плоскої хвилі від межі розподілу двох середовищ, тобто хвиля повністю проходить з одного середовища в інше. Це явище широко використовується в поляризаційних фільтрах, рефрактометрії, лазерній техніці, оптичній мікроскопії. Однак деякі специфічні застосування (наприклад, антиблікові покриття сонячних елементів) потребують придушення відбиття при кутах, близьких до нормального або, навпаки, до ковзаючого, що потребує зміщення кута Брюстера, недосяжного з використанням наявних оптичних матеріалів. В цій роботі запропоновано концепцію, аналітично та чисельно продемонстровано зміщення кута Брюстера за допомогою двовимірних (2D) матеріалів та структур.

Виведено рівняння Френеля для випадку двовимірного ультратонкого шару на межі двох середовищ з різними показниками заломлення. Двовимірний шар може бути представлений наноструктурами, метаповерхнями, 2D матеріалами (графен, гексагональний нітрид бору, моношари дихалькогенідів перехідних металів, тощо) і описується поверхневою провідністю [1]. Наявність такого 2D шару може викликати зміщення кута Брюстера, як це було раніше показано на графені [2].

У роботі аналітично виведено та досліджено вплив поверхневої провідності 2D шару на зміщення кута Брюстера в кутовому спектрі відбиття. Так, на Рис. 1 показано зміщення кута Брюстера на 4.6° при використанні 2D шару з поверхневою провідністю 0.5 мСм на межі розподілу повітря й скла. Проаналізовані випадки з використанням графену та плазмонних метаповерхонь. Результати аналітичних формул підтверджені за допомогою відповідного чисельного моделювання методом скінченних елементів.

Отримані результати можуть знайти застосування в динамічно керованих поляризаційних фільтрах та значно розширити фундаментальні знання з фізики взаємодії світла і речовини.

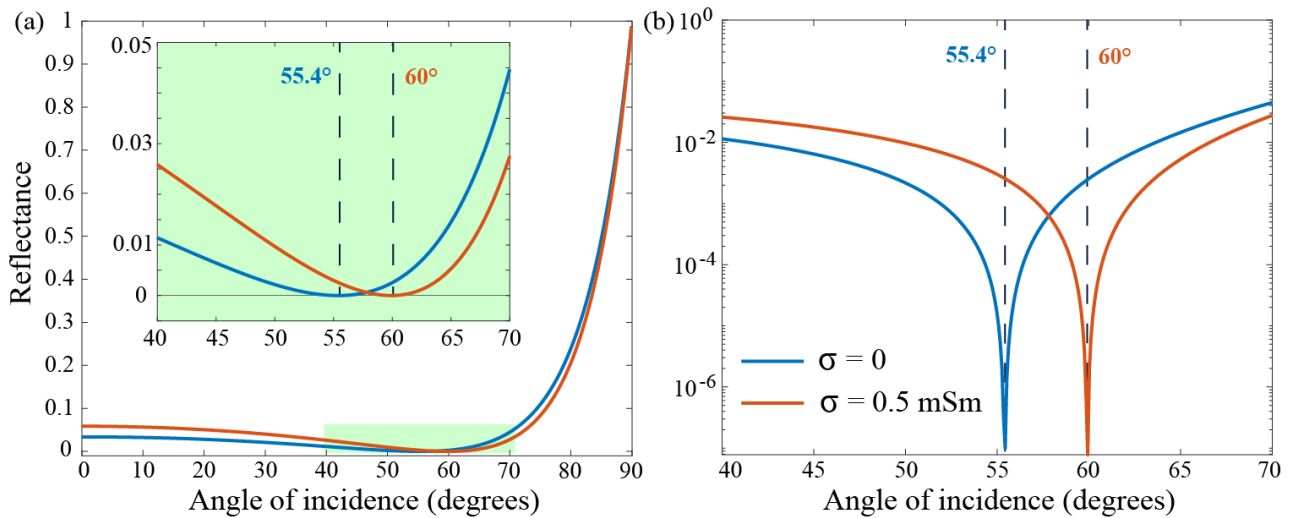


Рис. 1. (а) Залежність відбиття ТМ-поляризованої плоскої хвилі від кута падіння на межі двох середовищ з показниками заломлення 1 та 1.45 без (синя лінія) та з (червона лінія) двовимірним шаром з провідністю 0.5 мСм. Вставка помічена зеленим прямокутником показує відбиття в діапазоні кутів падіння від 40° до 70°. (б) Залежність відбиття у логарифмічній шкалі в діапазоні кутів падіння від 40° до 70°. Пунктирні лінії показують відповідні кути Брюстера.

- [1] A. Andryieuski, and A. Lavrinenko, Opt. Express, 21(7), 9144 (2013).
- [2] Z. Chen, X. Chen, L. Tao, K. Chen, M. Long, X. Liu, K. Yan, R. I. Stantchev, E. Pickwell-MacPherson, and J.-B. Xu, Nat. Commun., 9, 4909 (2018).

ХАРАКТЕРИСТИКИ ГАЗОРОЗРЯДНОЇ УЛЬТРАФІОЛЕТОВОЇ ЛАМПИ НА ПАРОГАЗОВІЙ СУМІШІ «Ne – Ag₂S»

М.І. Ватрала, Р.В. Грицак, К.А. Семенюк, О.К. Шуаїбов

*ДВНЗ «Ужгородський національний університет»,
Народна пл.3, м. Ужгород
e-mail: mariana.vatrala@uzhnu.edu.ua*

Серед фізичних методів синтезу металевих наноструктур важливе місце належить способу їх осадження з плазми перенапруженого наносекундного розряду при асистуванні ультрафіолетовим випромінюванням плазми цього ж розряду [1]. Таким способом були синтезовані поверхневі структури оксидів перехідних металів [2]. Для реалізації такої методики важливо, щоб плазма розряду була джерелом УФ- випромінювання на переходах атомів і іонів металу, з якого виготовлені електроди. Для перенапруженого розряду між електродами з сульфіду срібла, який перспективний для синтезу тонких плівок суперіонного провідника – сульфіду срібла (Ag₂S), такі дані відсутні.

В доповіді приводяться результати дослідження характеристик газорозрядної УФ-лампи на парах сульфіду срібла з накачуванням наносекундним розрядом між електродами з сульфідом срібла в неоні, яка може бути основою плазмохімічного реактора з синтезу тонких плівок сульфіду срібла.

Діаметр циліндричних електродів, виготовлених з сульфіду срібла, складав 5 мм, а радіус заокруглення робочої торцевої частини електродів був рівним 3 мм. Віддаль між електродами – 2 мм, частота імпульсів напруги - 40-1000 Гц, тиск неону – 101.3 кПа. Пари срібла вносились у плазму в результаті мікрровибухів природних неоднорідностей поверхні полікристалічних електродів у сильному електричному полі наносекундного розряду. Більш детально техніка експерименту наведена в [2].

Максимальна імпульсна потужність розряду досягала 900 кВт, а енергетичний внесок у плазму за один імпульс був рівним 43.9 мДж.

УФ-випромінювання наносекундного розряду на основі неону і парів срібла було представлено інтенсивними спектральними лініями атомів (найбільш інтенсивною була лінія 328.0 нм AgI) та однозарядних іонів срібла (найбільш інтенсивною була лінія 233.13 нм AgII). У червоній області спектру спостерігалось випромінювання на переходах атома неону.

Дослідження впливу на інтенсивність спектральних ліній срібла частоти слідування імпульсів показало, що інтенсивність спектральних ліній атомів і іонів срібла зростала зі збільшенням частоти слідування імпульсів з 40 до 1000 Гц не прямопропорційно зміні частоти, що вказувало на значний вплив процесів гасіння

верхніх енергетичних рівнів атомів та іонів срібла буферними газами у міжімпульсний проміжок часу.

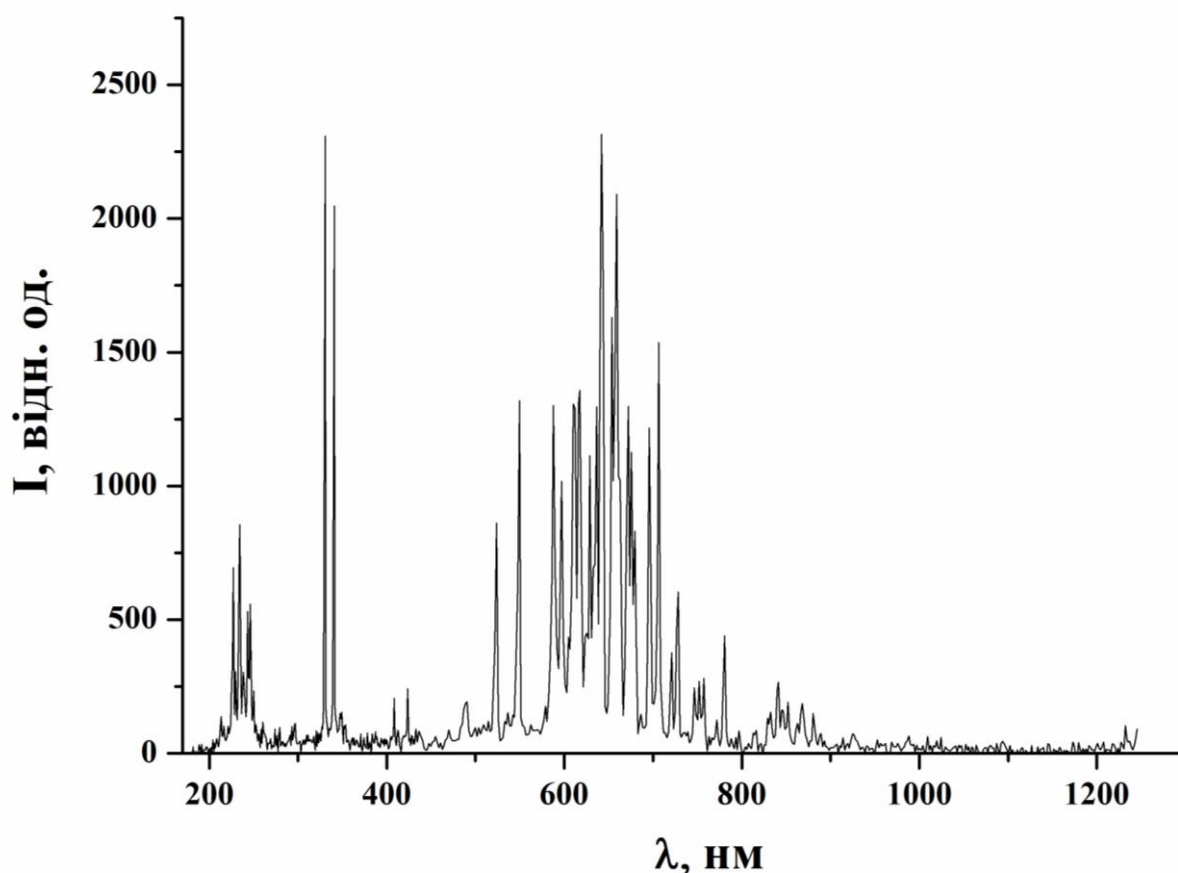


Рис.1. Спектр випромінювання розряду в суміші неону з парами сульфїду срібла при $p(\text{Ne}) = 101,3$ кПа.

Найбільш імовірними процесами утворення збуджених атомів і іонів срібла у плазмі наносекундного розряду між електродами зі срібла в неоні можуть бути реакції збудження електронами та процеси діелектронної рекомбінації. Такий розряд може бути застосований як лампа для автоматичного опромінення підкладки і зародків плівки сульфїду срібла на ній УФ випромінюванням атомів і іонів срібла, що перспективно для впливу на електричні характеристики таких плівок.

- [1] O.K. Shuaibov, A.O. Malinina, Progress in Physics of Metals, 22, 382 (2021).
- [2] A.K. Shuaibov, A.Y Minya, Z.T. Gomoki, A.A. Malinina, A.N. Malinin, Surface Engineering and Applied Electrochemistry, 56, 510 (2020) .

ДОСЛІДЖЕННЯ РАДІАЦІЙНОЇ СТІЙКОСТІ АДСОРБЕНТІВ З ВИКОРИСТАННЯМ ДЖЕРЕЛА СІРІУС

О. Сич, В. Лазур, Г. Васильєва, О. Окунєв, К. Стратійчук, А. Запорожець

Ужгородський національний університет, Ужгород
e-mail: Hanna.vasylyeva@uzhnu.edu.ua

Очищення водних розчинів від радіоактивних забруднень є надзвичайно актуальною науковою темою сьогодення. Існує велика кількість органічних та неорганічних адсорбентів, які можуть бути рекомендовані для адсорбції йонів важких металів та радіонуклідів із водних розчинів, або як носії для зберігання і захоронення радіоактивних відходів. Серед них йонообмінні смоли [1], адсорбенти на основі діоксиду титану або силікату титану [2], цеоліти, магнітокеровані адсорбенти, тощо. Однак, лише невелика частка наукових робіт присвячена дослідженню радіаційної стійкості адсорбентів. Хоча радіонукліди у той же час є джерелами іонізуючого випромінювання і така характеристика як радіаційна стійкість адсорбенту є важливою. Якщо адсорбент не є стійким до дії іонізуючого випромінювання, то навіть при високій адсорбційній спроможності, він буде руйнуватися під дією випромінювання радіонукліду і радіонуклід знову може потрапити у навколишнє середовище. Тому мета даної роботи – дослідження радіаційної стійкості адсорбентів до дії інтенсивного бета-випромінювання.

Дослідження радіаційної стійкості органічного і неорганічного адсорбентів відносно високоенергетичного β -випромінювання проводили з використанням ^{90}Sr - ^{90}Y джерела β -часток Sirius, встановленого у Мікротронній лабораторії ДВНЗ «УжНУ». Органічний адсорбент (Dowex HCR s/s) та неорганічний адсорбент на основі силікату титану (TiSi) зважували, поміщали у поліетиленовий контейнер і розміщували поблизу джерела інтенсивного β -випромінювання. Відстань від джерела до зразків адсорбентів складала 28 см. Потік електронів на такій відстані становив 10^8 ел/см²·с. Тривалість опромінення складала 24, 48 годин у трьох серіях досліджень. Дозу опромінення контролювали клінічним дозиметром. Крім високоенергетичних електронів джерело випромінювало потік антинейтрино [3]. Високоенергетичні β -частки, у свою чергу, генерували гальмівне випромінювання. Розподіл усіх видів випромінювання ^{90}Sr - ^{90}Y джерела за енергією наведено у базі даних [4].

Після опромінення адсорбенти витримували деякий час у темному приміщенні, а потім проводили дослідження адсорбції йонів стронцію (стабільних ізотопів стронцію) із водного розчину SrCl_2 у нейтральному середовищі. Початкову і рівноважну концентрацію йонів стронцію визначали методом комплексонометричного титрування [1, 2].

Результати досліджень показали незмінність адсорбційних властивостей досліджених адсорбентів після опромінення протягом 48 годин. При подальшому опроміненні органічний адсорбент дещо втратив свою адсорбційну здатність щодо катіонів стронцію. Загалом неорганічний адсорбент на основі силікату титану виявився більш стійким до дії високоенергетичного β -випромінювання в описаних нами умовах.

- [1] H.Vasylyeva, I.Mironyuk, M.Strilchuk, et al. Physics and Chemistry of Solid State, 3, 460 (2021).
- [2] H.Vasylyeva, I.Mironyuk, M.Strilchuk, et al. Chemical Physics Impact, 3, 100056 (2021).
- [3] N.A. Marks, D.J.Carter, M. Sassi, et al. J. PhysCondensMatter. 25 (6), 065504 (2013).
- [4] <https://www-nds.iaea.org/relnsd/vcharthtml/VChartHTML.html>

DESIGNING HYPERBOLIC METASURFACE

A. Hrinchenko, O. Yermakov

V. N. Karazin National University, Kharkiv
e-mail: artitus1509@gmail.com

Hyperbolic metasurfaces are known for their unique properties such as negative refraction, hyperlensing, enhanced spontaneous emission, etc [1]. With their help, it is possible to improve various areas of science and technology, for example, optical systems for processing and transferring data, quantum communications, biosensing. The experience of using hyperbolic metasurfaces has been proven in many works [1]. However, there is no algorithm for engineering and designing hyperbolic metasurfaces with given properties to date. Hyperbolic regime of a metasurface is defined via the indefinite two-dimensional tensor of surface conductivity, i.e. its components have different signs. In this state, the isofrequency contours in the wavevector space are hyperbolas. The surface waves localized at hyperbolic metasurfaces are called hyperbolic plasmon-polaritons [2,3] and exhibit a lot of potential applications [4].

In this work, we analyze a design of a metasurface based on gold nanodisks with elliptical cross-section packed in a square lattice (Fig. 1), which is described via the effective surface conductivity tensor. Namely, we study the dependence of the surface conductivity tensor spectrum on the geometric parameters. In particular, we derive the behavior of the spectral width of hyperbolic regime on the lattice period, the radius and the stretching factor of nanodisk.

This work may be considered as a practical instruction for the designing of hyperbolic metasurfaces with specific desired properties.

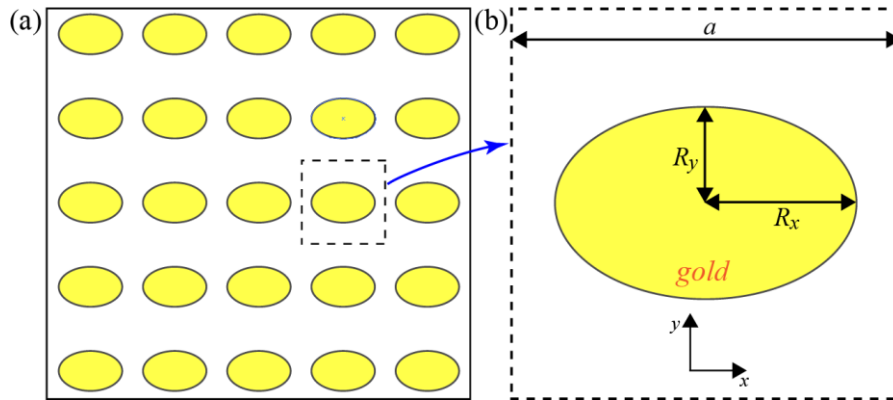


Fig.1. (a) Plasmonic metasurface representing the square array of gold nanodisks with elliptical cross-section. (b) Unit-cell area characterized by a period a . The long and short semi-axes of each nanodisk are marked by R_x and R_y , respectively.

- [1] O. Takayama, A. V. Lavrinenko, J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys., 36(8), 38 (2019).
- [2] J. S. Gomez-Diaz, M. Tymchenko, A. Alu, Phys. Rev. Lett., 114(23), 233901 (2015).
- [3] O. Yermakov et al., Phys. Rev. B, 91(23), 235423 (2015).
- [4] J. S. Gomez-Diaz, A. Alu, ACS Photonics, 3(12), 2211 (2016).

PECULIARITIES OF PHASE DIAGRAMS OF HYDROCARBONS WITH HETEROATOM

A.V. Karachevtseva, V.A. Konstantinov, V.V. Sagan

*B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of NAS of Ukraine,
Kharkiv, Ukraine
e-mail: zvonyova@ilt.kharkov.ua*

This abstract is devoted to the graphical representation of the equilibrium states of a substance as a function of temperature, pressure and volume. Each substance has several phase states. These phase states differ in a lifetime. Phase states with an unlimited lifetime are called stable. Phase states with a limited lifetime are called metastable.

At normal atmospheric pressure, the transitions between solid-solid, solid-liquid and gas-liquid phases can be considered as points on the temperature scale. These points may be considered as characteristic of each substance. If the pressure varies, it leads to changes in the phase transition temperature. The “triple point” is the point at which the liquid, solid, and vapor phases can exist together. V-T diagrams make it possible to observe visually the positions of phase boundaries in isochoric studies of thermal properties, such as thermal conductivity, heat capacity, dielectric properties, etc.

The object of our research was the metastable phases of heterocyclic hydrocarbons. We analyzed the experimental data for furan (C₄H₄O) [1], thiophene (C₄H₄S) [2] and tetrahydrofuran (C₄H₈O) [3].

All studies of thermal conductivity were carried out on the setup, using the method of stationary heat flow in a cell of coaxial geometry. The setup, samples growing procedure and experimentation are described in detail in [4].

The changes in molar volume during melting and the boundaries of the existence of high temperature phases have been determined. The magnitudes of thermal pressure of cyclic hydrocarbons studied were obtained. Experimental values of dP_m/dT on the melting line were compared with those calculated by the Clapeyron-Clausius formula.

[1] V. A. Konstantinov, V. P. Revyakin, V. V. Sagan, and A. V. Zvonaryova, *Low Temp. Phys.* 39, 473 (2013).

[2] V. A. Konstantinov, V. V. Sagan, V. P. Revyakin, and A. V. Karachevtseva, *Low Temp. Phys.* 41, 213 (2015).

[3] V. A. Konstantinov, V. V. Sagan, V. P. Revyakin, and A. V. Karachevtseva, *Low Temp. Phys.* 40, 1008 (2014).

[4] V. A. Konstantinov, S. A. Smirnov, and V. P. Revyakin, *Instr. Eksp. Tech.* 42, 133 (1999).

Acknowledgments:

This work was supported by the National Research Foundation of Ukraine (Grant No.197/02.2020).

PULSATING BROWNIAN MOTOR WITH DOUBLE-SINE POTENTIAL: SPECIFICS OF PARAMETERIZATION

A.D. Terets^{1,2}, T.Ye. Korochkova²

¹*Faculty of Physics, Taras Shevchenko National University of Kyiv,
Kyiv, Ukraine*

²*Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, 17 General Naumov Str., Kyiv
Ukraine*

e-mail: tais.crust@gmail.com

A pulsating Brownian motor is one of the classes of Brownian motors [1, 2] in which the directed motion of nanoparticles occurs in the field of action of a stationary periodic asymmetric potential, which experiences some perturbations. As a stationary potential, a sawtooth profile or a double-sine profile is most often used [1]. The first one is a combination of linear sections and is characterized by two independent parameters: amplitude and asymmetry

coefficient. The double-sine potential serves as some analogue of the sawtooth one for the case of a smooth potential energy dependence and is generally given by $u(x) = u_0 [\sin(2\pi x / L) + \alpha \sin(4\pi x / L)]$. The presence of a variable coefficient α makes it possible to indirectly change the asymmetry of the stationary potential, however, it also contributes to the potential amplitude. In order to separate the asymmetry and amplitude parameters by analogy with the sawtooth potential, we propose to introduce an additional normalization coefficient $C_n(\alpha)$ into the expression for the potential profile $\tilde{u}(x) = u_0 C_n(\alpha) [\sin(2\pi x / L) + \alpha \sin(4\pi x / L)]$. Then the part $u(x)C_n(\alpha)/u_0$, responsible for the form factor of the potential, is characterized by a unit amplitude (see Fig. 1).

In the framework of the approximation of small fluctuations [3], a stochastic Brownian motor with a stationary normalized double-sine potential $\tilde{u}(x)$ and a small perturbing harmonic signal $w(x) = w \cos[2\pi(x/L - \lambda_0)]$ was studied. In particular, the dependence of the motor operation on the parameter α was researched. Fig. 2a shows a family of dependence curves of the ratio of the reduced flux $J / J_{\max}$ on the coefficient α for different values of the temperature parameter βu_0 . It turns out that for different temperatures the maximum value of the flux $J_{\max}$ is achieved at different values of α : at

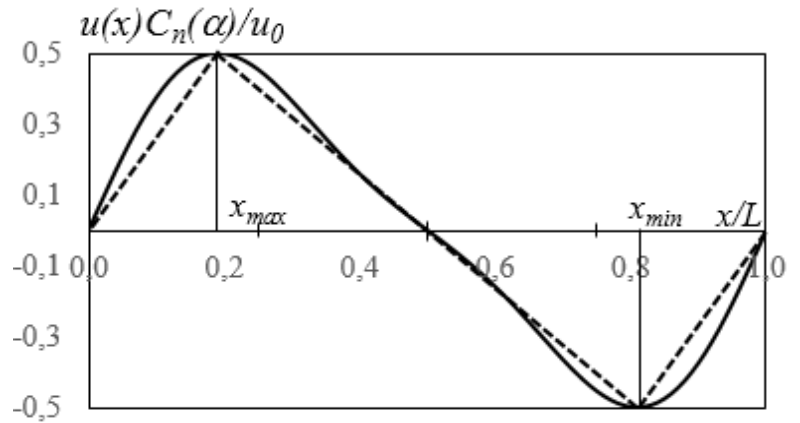


Fig.1. The normalized stationary component of the potential that determines the shape of the potential profile

high temperatures of the order $\alpha \approx 0.5$ (for $\beta u_0 = 0.1$) and up to $\alpha \approx 1.4$ for $\beta u_0 = 15$. Positions of maxima $\alpha_{\max}$ depending on the temperature parameter βu_0 are shown on Fig. 2b.

Thus, a shift of the maximum fluxes $J_{\max}$ to a larger α with an increase in the parameter βu_0 can be explained by an increase in the sensitivity of the Brownian motor to the shape of the potential profile with a decrease in temperature (or, equivalently, an increase in amplitude)

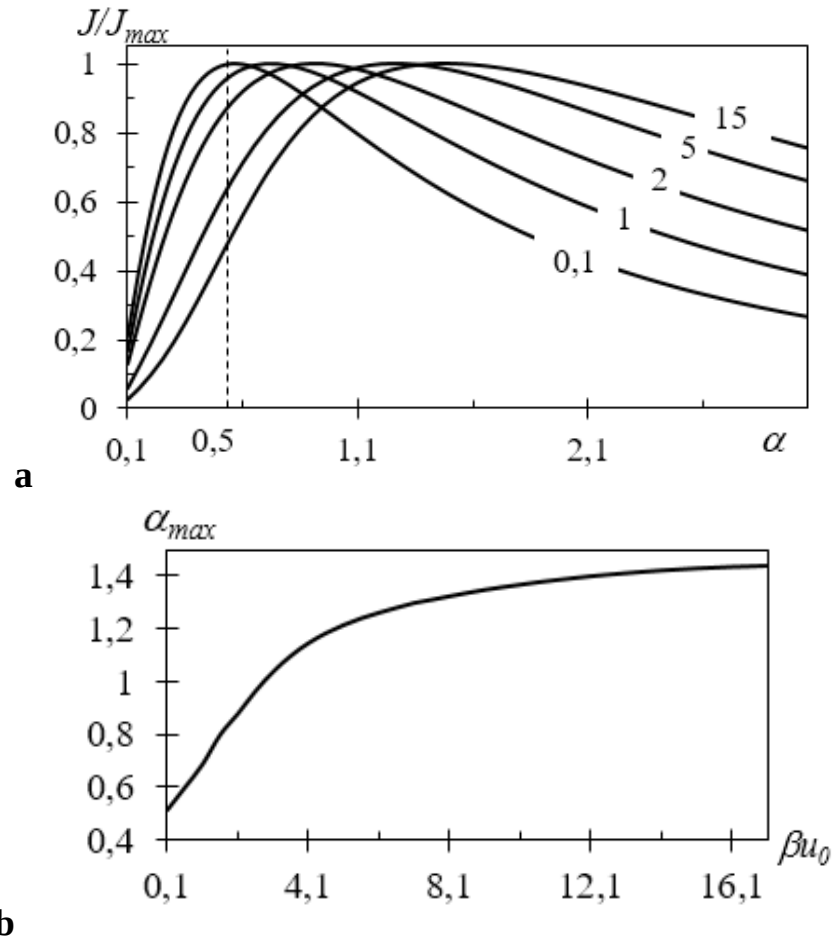


Fig.2. a) The reduced flux $J / J_{\max}$ depending on the parameter α , the values of the temperature parameter βu_0 are indicated on the curves. **b)** Positions of maxima $\alpha_{\max}$ depending on the temperature parameter βu_0 .

- [1] P. Reimann, Phys. Rep. 361, 57 (2002).
- [2] D. Cubero, F. Renzoni. Brownian Ratchets: From Statistical Physics to Bio and Nano-motors (Cambridge, Cambridge University Press, 2016).
- [3] U. A. Vysotskaya, I. V. Shapochkina, T. Ye. Korochkova, V. M. Rozenbaum, Him. Fiz. Tehnol. Poverhni, 8 (3), 299 (2017).

ДОСЛІДЖЕННЯ СПЕКТРІВ ЕЛЕКТРОН-ФОТОННОЇ ЕМІСІЇ ПОВЕРХОНЬ МОНОКРИСТАЛУ ХЛОРИДУ НАТРІЮ МОДИФІКОВАНИХ НАПИЛЕННЯМ НАНОПЛІВОК ОКСИДІВ МІДІ І ЦИНКУ

Й.Й. Брандіс, А.А. Сливка, А.А. Минка, О.М. Конопльов
Кафедра квантової електроніки, Фізичний факультет, УжНУ
e-mail: yosyp.brandis@uzhnu.edu.ua

Дослідження спектральних характеристик наноплівки оксидів міді і цинку є актуальним завдяки їх чудовим оптичним і електричним властивостям, що дає можливість використовувати їх в мікро-нано електроніці зокрема в сонячних елементах, датчиках газу, тощо.

Метою даних досліджень було адаптувати метод електрон-фотонної спектроскопії (ЕФС) [1] для дослідження емісійних та люмінесцентних характеристик як «чистої» так і модифікованої напиленням тонких наноплівок CuO та ZnO поверхонь кристалу NaCl, а також дослідити вплив цих оксидів на люмінесцентні та спектральні властивості NaCl.

Лужно-галоїдні кристали натрію мають достатньо просту кристалічну і електронну структуру і тому були використані як зручна модельна система для вивчення різноманітних кристалічних дефектів, в тому числі тих, що виникають при модифікації поверхні нанодомішками і суттєво впливають на оптичні і спектральні характеристики електрон-фотонної емісії (ЕФЕ).

В якості заготовки для мішеней використовувався монокристал NaCl з високими трансляційними властивостями. З одного сколу цього кристалу готувалося декілька однакових мішеней (12х6х3мм). Один з цих зразків, використовувався як «чистий», тобто без напилень. Поверхні інших зразків модифікувались оксидом міді та цинку. Модифікація поверхні здійснювалася методом осадження плівки оксидів на підкладку NaCl, що була встановлена на віддалі 3 см від центру розрядного проміжку [2], між мідними або цинковими електродами. Амплітуда імпульсів струму складала 50-150А (5-100 нс). Пари міді або цинку вносились в розрядний проміжок за рахунок мікрориву неоднорідностей поверхні електродів в сильному електричному полі і формуванні ектонів. Плівки оксидів металів формувались в плазмі повітря атмосферного тиску. Товщина наноплівок виміряна еліпсометричним методом і складала близько 35нм.

Дослідження люмінесценції чистого кристалу NaCl та з напиленими на його поверхню наночастинок CuO та ZnO проведено на надвисоковакуумній установці УСУ-4 методом електрон-фотонної спектроскопії. Робочий тиск залишкових газів в камері взаємодії не перевищував 10^{-9} Тор. Енергія пучка електронів в усіх етапах

досліджень становила 600 еВ. Діаметр поперечного перерізу пучка електронів складав 5 мм при струмі бомбардуючих електронів 20 мА.

Спостереження здійснювалось вздовж нормалі до поверхні мішені ($\theta \approx 0^\circ$), а бомбардування проводили під кутом 15° від нормалі до поверхні. Для всіх зразків дослідження здійснювалися в оптичному інтервалі від 2000 до 8000 Å.

На (рис. 1.) приведені спектри ЕФЕ поверхонь "чистого" монокристалу NaCl та поверхонь модифікованих напыленням тонких плівок оксидів металів міді і цинку. Вони записані при ширині щілин монохроматора 0,25 мм. В експерименті було використано дифракційну ґратку з 1200 штр/мм, для якої величина оберненої лінійної дисперсії складає 16 Å/мм. Експериментально було забезпечено роздільну здатність не гірше 4 Å.

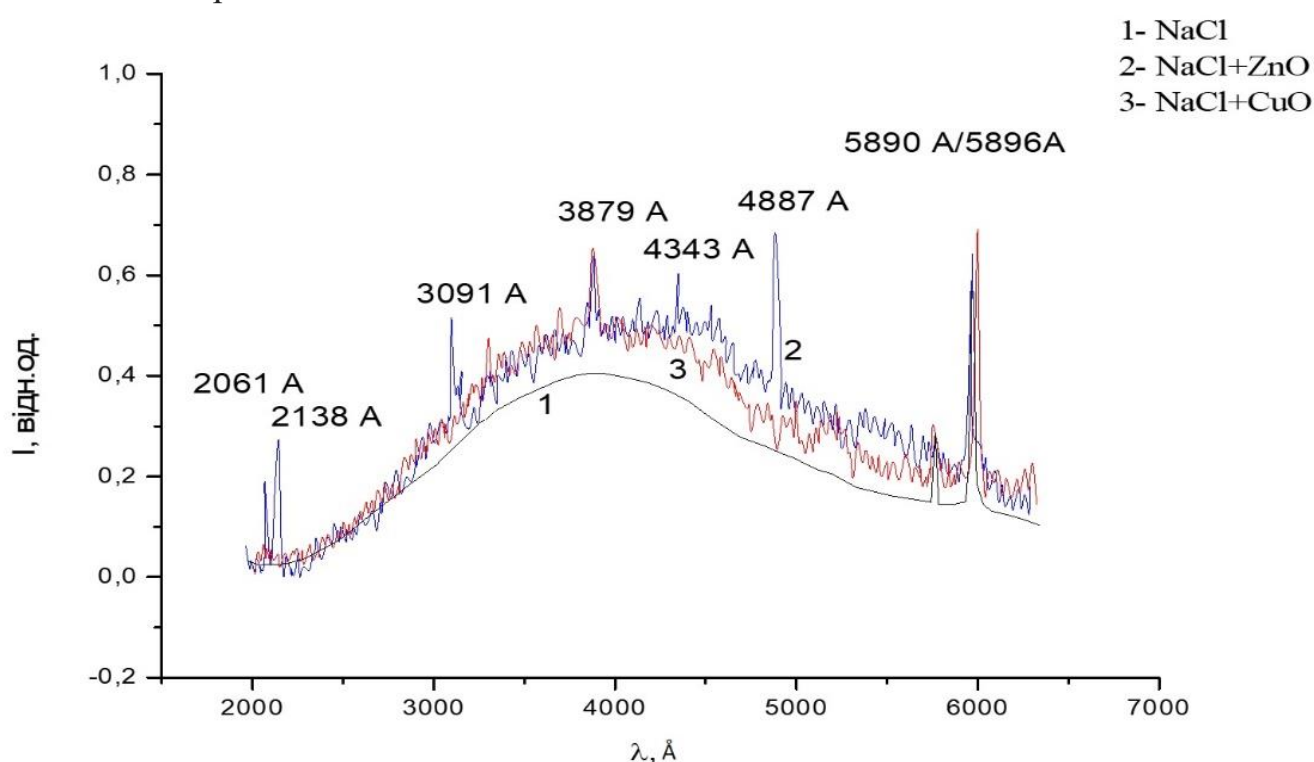


Рис.1. Спектри ЕФЕ поверхонь : 1-NaCl; 2- NaCl + ZnO; 3-NaCl + CuO.

В спектрах ЕФЕ чистого кристалу NaCl виявлено неперервне випромінювання з поверхневого шару мішені та характеристичне випромінювання збуджених розпорошених атомів натрію (NaI 5890/5896 Å; NaI 5682/5688 Å). Неперервне випромінювання з максимумом при $\lambda \sim 3900$ Å, яке спостерігається в області довжин хвиль 2300 – 6000 Å, є рекомбінаційним світінням, яке виникає внаслідок збудження електрон-діркових пар електронної підсистеми NaCl і наявності дефектів типу F-центрів в об'ємі кристала. Наявність в спектрі ліній атомів пояснюється збудженням первинними електронами глибоких електронних оболонок натрію. Їх подальше захоплення призводить до утворення оже-

електронів і заряджених частинок - іонів. Вивільнена при цьому енергія може бути затрачена на розрив зв'язку натрію з кристалом і його відльоту від поверхні.

У спектрах ЕФЕ зразків $\text{NaCl}+\text{CuO}$ та $\text{NaCl}+\text{ZnO}$ виявлено неперервне випромінювання з максимумами $3879\text{\AA}$ для мішені $\text{NaCl}+\text{CuO}$ і $4100\text{\AA}$ для мішені $\text{NaCl}+\text{ZnO}$, а також смуги меншої інтенсивності. Природа випромінювачів цих смуг обговорюється. В спектрі ЕФЕ поверхні $\text{NaCl}+\text{ZnO}$ виявлено характеристичне випромінювання атомарних ліній $\text{Na } 5890/5896\text{\AA}$, $\text{Zn } 2061\text{\AA}$, $\text{Zn } 2138\text{\AA}$. Інші атомарні лінії в спектрі ідентифіковані нами, як Fe і Ni , що потрапили на мішень під час наплення плівок з електродів. Отримані спектри і їх аналіз говорять про високу чутливість методу ЕФС для досліджень наноструктурованих поверхонь.

- [1] І.Є. Митропольський, В.В. Кузьма, О.М. Конопльов, В.С.Буксар, Науковий вісник Ужгородського унів-ту. Серія Фізика. 40, 130-137 (2016).
- [2] А.К. Шуайбов, А.Й. Миня, З.Т. Гомоки, В.В. Данило, Р.В., Электронная обработка материалов. 54, 46-50 (2018).

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТОПОЛОГІЧНОЇ ЗВ'ЯЗНОСТІ БІООРГАНІЧНИХ СПОЛУК В РАДІАЦІЙНИХ ЕКСПЕРИМЕНТАХ

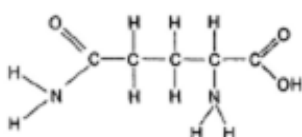
В.П. Ганулич¹, В.М. Маслюк²

¹Ужгородський національний університет, Ужгород
²Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород
e-mail: hanulych.vitalii@student.uzhnu.edu.ua

Відомим є інтерес до проблеми моделювання структури та дослідження стійкості біоорганічних сполук як амінокислоти, моносахариди, спирти, інші, які є базовими елементами для побудови білків. Як правило, вони містять 20-30 атомів, що виділяє їх як зручні об'єкти як першопринципних розрахунків структурних та енергетичних параметрів, так і моделювання топологічних перетворень. На практиці, такі перетворення стимулюються радіацією, що приводить до утворення метастабільних структур. Наявність в амінокислотах сильних та слабких гомо- та гетеро зв'язків, ізольованих структурних сегментів дозволяє досліджувати такі перетворення, комбінуючи їх у різних комбінаціях як у грі Лего. Цей напрямок науки отримав назву «клік-хімія» [1].

Нами для моделювання топологічної зв'язності біоорганічних сполук, які зазнають деструкції в радіаційних експериментах використані комп'ютерні технології, а саме пакет Unity для 3D графічного моделювання. Розглядаються біоорганічні сполуки, що містять атоми С, Н, N, О загальною формулою $C_xH_yN_zO_{1-x-y-z}$. У модельних розрахунках використовувався метод структурних комбінацій і кольорової статистики, який враховує статистичну нерівність атомів біомолекул з різною енергією зв'язку. Розрахунки зручно проводити в рамках Ball-and-Stick моделі, яка дозволяє візуалізувати 2D та 3D положення атомів та зв'язки між ними. Енергія зв'язку атома в такій моделі дорівнює сумі енергій розриву його хімічних зв'язків. Структурні особливості перетворень таких структур визначаються кольоровими наборами (КН), що містять атоми із різною енергією зв'язку у молекулі. Правило для позначення атомів КН наступне: вони позначаються великими літерами С, Н, О, N підстрокові символи с, h, o, n позначають його хімічні зв'язки із атомами-сусідами. Тоді для молекули глюкози із $M = 24$ атомів формулою $C_{0,25}H_{0,5}O_{0,25}$ можна встановити наступний КН, $\{C_{coh}, 4C_{cch}, C_{c2oh}, 5O_{ch}, O_{2c}, 7H_c, 5H_o\}$, тут C_{c2oh} , O_{2c} позначають атоми, що мають подвійний зв'язок, відповідно, із киснем та вуглецем. Приведемо такі дані із топологічним моделюванням для амінокислот:

ГЛУТАМІН



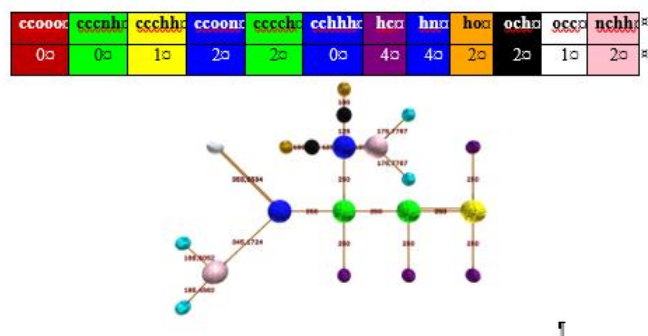
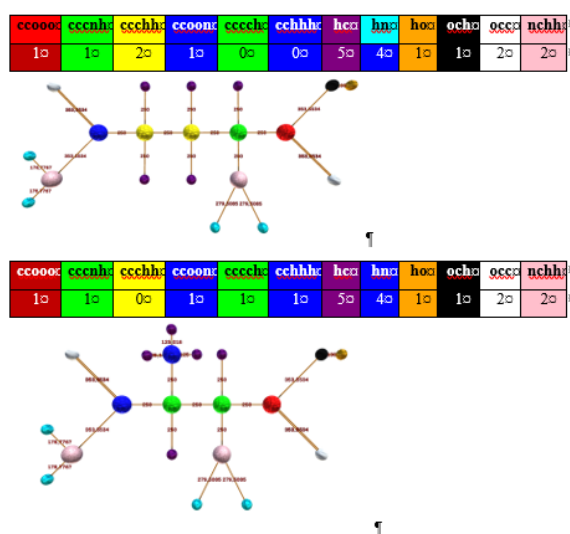
$C_5H_{10}N_2O_3$ - 20 атомів
 $C_{a1}H_{a2}N_{a3}O_{a4}$ ($a1+a2+a3+a4=1$)
 $a1=0.25$; $a2=0.5$; $a3=0.1$; $a4=0.15$

Кольорові набори

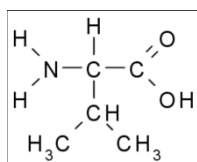
$Cc2oo$, $Cccnh$, 2 $Ccchh$, $Ccoon$, $Cccch$, $Cchhh$, Och , 2
 Ooc

2 $Nchh$,
5 Hc , 4 Hn , Ho

Результати топологічного моделювання:



ВАЛІН



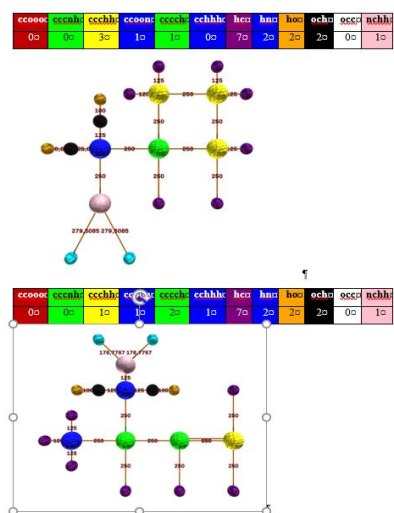
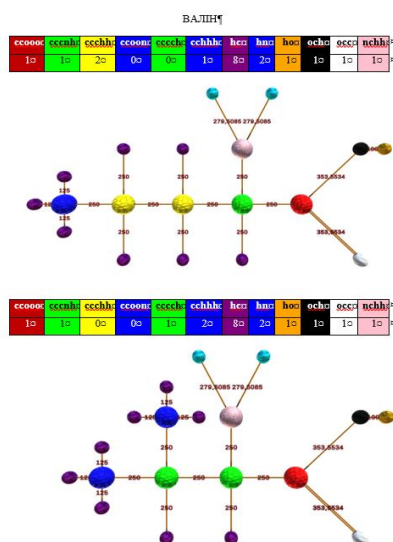
C₅H₁₁NO₂. 19 атомів
C_{a1}H_{a2}N_{a3}O_{a4} (a₁+a₂+a₃+a₄=1)
a₁=5/19; a₂=11/19; a₃=1/19; a₄=2/19

Кольорові набори

Cc2oo, Cccnh, Cccch, 2 Cchhh, Och,
Occ

Nchh, 8Hhc, 2 Hn, Ho

Результати топологічного моделювання:



Таким чином, методи комп'ютерного моделювання дозволяють реалізувати різні типи структури для реальних та метастабільних станів біоорганічних структур.

- [1] N. Z. Fantoni, A. H. El-Sagheer, T. Brown Chem. Rev. 2021, 121, 7122–7154
<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.0c00928>

ОДЕРЖАННЯ НАНОКРИСТАЛІЧНОГО КОМПОЗИТУ В СИСТЕМІ As_2S_3 – Bi_2S_3

С.І. Павлей, А.М. Соломон, С.М. Гасинець, І.М. Войнарович

*Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна
e-mail: staspavlej5@gmail.com*

Напівпровідникові наноструктури наділені широким спектром нових властивостей, які відрізняються від твердотільних масивних матеріалів. Зменшення розмірності в одному, двох або трьох напрямках надає нові можливості створення матеріалів і пристроїв зі специфічними характеристиками та зміну їхніх властивостей за допомогою явища квантового розмірного ефекту. Нанокристалічні напівпровідники, впроваджені в діелектричну матрицю, є добре відомим і класичним об'єктом матеріалознавства наноматеріалів. Наноккомпозити халькогенідів металів, впроваджені в матрицю халькогенідного скла, завдяки унікальним оптичним властивостям, таким як низькі енергії фононів, висока прозорість в ближній та середній інфрачервоній областях, високий лінійний і нелінійний показник заломлення, можуть бути перспективними матеріалами в оптиці, електроніці, оптоелектроніці, матеріалознавстві та інженерії. Поєднання аморфного халькогенідного скла як основного середовища та нанокристалів сульфідів вісмуту привертає наш інтерес, оскільки внутрішня анізотропія в кристалічній структурі цього матеріалу сприяє утворенню одномірних наноструктур, зокрема наноголок, нанострічок. Ці наноструктури можуть знайти важливе застосування в багатьох пристроях, наприклад, польових електронних емітерах, сонячних елементах.

Композитні стекла системи As_2S_3 – Bi_2S_3 були отримані з бінарних сполук As_2S_3 і Bi_2S_3 чистоти ОСЧ, методом прямого сплавлення в евакуйованих кварцових ампулах. Формування наноккомпозиту здійснювали шляхом перекристалізації швидко загартованих композитних стекол $(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}(\text{Bi}_2\text{S}_3)_x$ ($x = 0.04, 0.06, 0.1, 0.12$) при різних температурно-часових режимах відпалу. Температурна область відпалу була оцінена за теорією гомогенного та гетерогенного зародкоутворення та росту кристалів і складала $220\text{--}280^\circ\text{C}$. Рентгенодифракційні дослідження відпалених композитних стекол As_2S_3 – Bi_2S_3 виявили кристалічну фазу сульфідів вісмуту. Розміри кристалічної фази, оцінені з рентгенівських дифрактограм за формулою Шеррера, складала $20\text{--}60$ нм.

РАДІАЦІЙНИЙ СКРИНІНГ МЕДИЧНИХ ПРИСКОРЮВАЧІВ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ ТЛ-ДОЗИМЕТРІЇ

А.В. Русин¹, О.Г. Савка¹, І.В. Стефанович¹, В. Obryk²,
О.М. Поп³, В.Т. Маслюк³

¹Комунальне некомерційне підприємство "Закарпатський протипухлинний центр"
Закарпатської обласної ради (КНП "ЗПЦ"ЗОР), Ужгород, Україна

²Institute of Nuclear Physics PAN, Kraków, Poland

³Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна
e-mail: oksana_pop@i.ua

Відомо, що променева терапія є одним із основних методів лікування онкологічних захворювань. На сьогодні у галузі радіаційної онкології застосовують велику кількість технологічних досягнень з фізики прискорювачів, тканиноеквівалентної дозиметрії, а також комп'ютерної технології та програмного забезпечення візуалізації умов опромінення. Звичайно ж основні принципи, які лежать в основі радіобіології променевої терапії не змінилися, а головні зусилля променевої терапії зводяться до покращення дозиметричного супроводу опромінення, зведення до мінімуму сторонніх ефектів. Це особливо актуально при залученні у практику променевої дозиметрії прискорювачів різного сорту ядерних частинок, різної енергії та щільностей їх потоків.

Невід'ємною частиною променевої терапії є клінічна дозиметрія, яка є необхідною при будь-яких лікувальних процедурах, де використовується іонізуюче випромінювання. Для оперативного вимірювання радіаційних полів опромінення медичних прискорювачів використовують, як правило, іонізаційні камери, які дають вихідну інформацію для встановлення поглинутої дози при терапевтичних процедурах.

Проте, привабливим є контроль дози *in situ* в тканино-еквівалентних фантомах, використовуючи тканиноеквівалентні термолюмінесцентні дозиметри (ТЛД). Вимірювання поглинутої дози у фантомах дозволяє не тільки проводити калібрування детекторів клінічної дозиметрії, але й вимірювати поля випромінювання. ТЛД дозиметрія дає змогу показувати рівень накопиченої дози радіації протягом певного часу, що важливо для радіаційної безпеки медичного персоналу. Наведене вище вказує на важливість відповідної ТЛД для практики променевої терапії, а також на необхідність співставлення не тільки різних дозиметричних технологій, але й співпраці людей різних галузей знань: лікарів, дозиметристів, а також ядерних фізиків.

У роботі представлені результати дослідження кристалів $Al_2O_3:C$ (детектори – ДПГ), $LiF:Mg,Cu,P$ (детектори – NCP, аналог TLD-100H (виробник Краків,

Польща)). Опромінення досліджуваних зразків дозами 1 Гр та 2 Гр проводилися в КНП "ЗПЦ"ЗОР на медичному прискорювачі фірми Varian Halcyon з енергією прискорених електронів 6 МеВ.

Вимірювання кривих фосфоресценції та термолюмінесценції (ТСЛ) для цілей даного експерименту проводилось спеціальним рідером. Для вимірювання інтенсивності люмінесцентного світлення було використано фотоелектронний помножувач типу ФЕП-136 у режимі лічби фотонів. Криві ТСЛ одержувалися в результаті лінійного нагріву досліджуваних зразків до 300°C. Контроль температури під час нагріву здійснювався за допомогою хромель-алюмелевої термопари. Для зменшення впливу федингу вимірювання, термолюмінесценція проводилась одразу після опромінення. В процесі опромінення було використано по два зразки кожного типу дозиметрів для дослідження відтворюваності отриманих результатів.

На рис. 1 приведено типові криві термолюмінесценції досліджуваних дозиметрів ДПГ та NCP, опромінених 1 Гр.

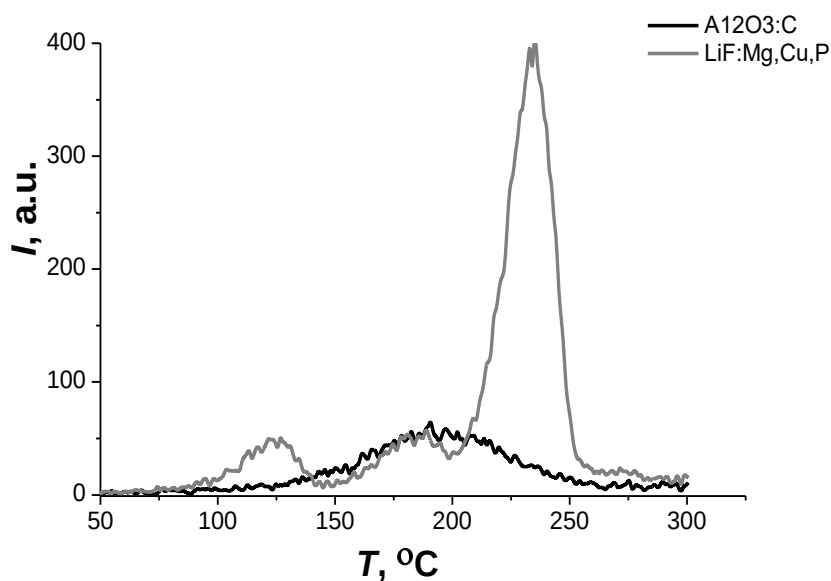


Рис. 1. Криві термовисвічування зразків ДПГ та NCP, опромінених 1 Гр.

Встановлено, що ТЛД дозиметрія перспективна для контролю не лише поглинутої дози персоналом, але й для проведення радіаційного скринінгу супутніх умов опромінення.

ББК В 3Г (4Укр – 4Зак), М 58
УДК 539.1

«Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів»: - Ужгород, Інститут електронної фізики НАН України, 2023. – 112 с.

ISBN 978-617-8127-16-9

Науково-інформаційне видання

ЗБІРНИК МАТЕРІАЛІВ КОНФЕРЕНЦІЇ ІЕФ-2023

Укладач:

В.І. Роман, к. ф.-м. н.

Відповідальні за випуск:

А.М. Завілопуло, д. ф.-м.н.,

Т.Ю Попик, к. ф.-м. н.

Матеріали подано в авторський редакції

Оригінал-макет: В.І. Роман

Обкладинка: В.І. Роман

Інститут електронної фізики НАН України
88017 м. Ужгород, вул. Університетська, 21
тел./факс: (0312) 64-36-50



Здано до складання 01.06.2023. Підписано до друку 02.06.2023.

Формат 60x84/16. Гарнітура Times New Roman.

Друк циф. Ум. Друк. 6,06. Обл.-вид. Арк. 6,44

З оригінал-макетів замовника.

Наклад 100 примірників. Замовлення № 17

Видавництво «ФОП Сабов А.М.»

м. Ужгород, вул. Університетська, 21/220

Тел.: 099-315-00-93

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4815 від 25.02.2015 р.

Друк: ФОП Сабов А.М., тел.: 099-315-00-93

