

RNAAOPM - 2024

Lesya Ukrainka
Volyn National University

12th international
conference

Relaxed,
nonlinear &
acoustic
optical
processes &
materials

Lutsk, 2024
June 01-04

Міністерство освіти і науки України
Волинський національний університет імені Лесі Українки

РЕЛАКСАЦІЙНІ, НЕЛІНІЙНІ, АКУСТООПТИЧНІ ПРОЦЕСИ І
МАТЕРІАЛИ (РНАОПМ' 2024)

Матеріали
XII міжнародної наукової конференції
(Луцьк – Світязь, 01 – 04 червня 2024 року)
Присвяченої пам'яті Георгія Євlampійовича Давидюка
(80-річчю з дня народження)

RELAXED, NONLINEAR AND ACOUSTIC OPTICAL PROCESSES AND
MATERIALS (RNAOPM' 2024)

Proceedings
XII International scientific conference
(Lutsk – Svityaz', 01 – 04.06.2024)
Dedicated to the memory of Professor Georgy Yevlampievych Davidiuk (on the 80th
anniversary of his birth)

Луцьк
Вежа-Друк
2024

УДК 535+544

P36

Рекомендовано до друку вченою радою
Волинського національного університету імені Лесі Українки
(протокол №6 від 30 квітня 2024 року)

Organizer: Educational and scientific institute of physics and technologies of Lesya Ukrayinka Volyn National University, Shevchenko scientific Society, Ukrainian and European Physical Societies, the Ukrainian Society for Optical Engineering.

International Program Committee: P. Trokhimchuck, chair, Ukraine; V. Galyan, scientific secretary, Ukraine; A. Andrushchak, Ukraine; I. Barchiy, Ukraine; R. Golovchak, USA; S. Fedosov; L. Gulay; A. Kevshyn; M. Khvyshchun; Yu. Kogut; Y. Koval; O. Marchuk; V. Holovatsky, Ukraine; A. Holovin, USA; O. Khyzhun, Ukraine; B. Kotur, Ukraine; O. Makhanets, Ukraine; O. Makarenko, Ukraine; V. Maslov, Ukraine; B. Mytsyk, Ukraine; O. Pastukh, Poland; M. Piasecki, Poland; L. Piskach, Ukraine; A. Svidzinskiy, USA; V. Yuhymchuk, Ukraine.

Local Organizing Committee: H. Myronchuk, chair; V. Sakhnyuk, scientific secretary; T. Melnichuk; V. Nahod; M. Rudysh; P. Sakhnyuk, H. Shavarova, P. Shchepanskiy; P. Shygorin; D. Shvalikovskiy; P. Trokhimchuck; A. Tretyak; O. Novosad; A. Shutovskiy; B. Venhryn; T. Yatsinyuk; D. Zakharchuk.

Proceedings of XII-th International Conference «Actual problems of fundamental science» – APFS’2023 are represented. These results were reported on this conference.

Edition of materials are made from author texts and prepared to printing the Program Committee and Editorial Board of conference.

Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали: матеріали XII Міжнар. Р 36 наук. конф. – (Луцьк – Світязь, 01–04 черв. 2024 р.) – Луцьк : Вежа-Друк, 2024. – 116 с.

ISBN 978-966-940-568-5

Подано праці XII міжнародної наукової конференції “Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали” – РНАОПМ’ 2024. Матеріали було заслухано на конференції.

EDITORIAL BOARD: P. Trokhimchuck, Ukraine; H. Myronchuk, Ukraine; D. Shvalikovskiy, Ukraine, V/ Sakhnyuk, Ukraine.

УДК 535+544

ISBN 978-966-940-568-5

© Волинський національний університет
Імені Лесі Українки, 2024

Пам'яті Георгія Євлампійовича Давидюка
Галина МИРОНЧУК, Ніна ГОЛОВІНА, Андрій КЕВШИН
Волинський національний університет імені Лесі Українки



У цьому році виповнюється 80 років від дня народження Георгія Євлампійовича Давидюка – відомого фахівця у галузі фізики, доктора фізико-математичних наук, професора, заслуженого діяча науки і техніки України, завідувача кафедри фізики твердого тіла, проректора з наукової роботи Волинського національного університету імені Лесі Українки.

Народився Георгій 5 січня 1944 року на півночі Казахстану в поселенні репресованих українців у сім'ї Євлампа Давидюка. Після війни, у 1946 році, сім'я Давидюків повернулася на батьківщину, рідну Волинь, у селище міського типу Рожище.

У дитинстві Георгій Давидюк був кволою дитиною, через постійні хвороби (найчастіше це запалення легень) пропускав навчання у школі. Не складалося у хлопця з гуманітарними дисциплінами, проте точні науки він знав «на відмінно» і неодноразово перемагав на олімпіадах. По закінченню школи саме слабке здоров'я завадило вступу до Московського інституту кібернетики, але Георгій здає екзамени на фізико-математичний факультет Луцького педінституту. Та студентом відразу не стає і йде працювати вчителем фізики Киянської середньої загальноосвітньої трудової політехнічної школи з виробничим навчанням. Проте, незабаром з інституту повідомили, що він зарахований студентом. Георгій, один на курсі, здав першу сесію на відмінно. І потім, усі п'ять років не мав жодної четвірки, окрім наукового комунізму у останньому семестрі.

Усі повоєнні роки Луцький педінститут відзначався традиційно високим рівнем підготовки вчителів, фахівців фізики (Головіна, 2010). Завдяки своїй зацікавленості, знанням та підготовці Георгій вирішив учитися далі, одним із перших налаштувався на вступ до аспірантури у Київ. Академічні інститути Національної академії наук України займають чільне місце у підготовці наукового потенціалу країни. У них перебували в аспірантурі, працювали багато науковців, які згодом повернулися на Волинь, озброєні передовою думкою та проводили різнопланові наукові дослідження. Георгій Давидюк був одним із перших волинян, який у 1969 році вступив до аспірантури Інституту фізики Академії Наук України. Правда, не все було так просто: згадали про репресованих батьків, тому цільового направлення він не отримав, а поїхав складати екзамени на загальних підставах.

До цього часу Георгій заручився уже підтримкою рідних людей, адже у 1966 році одружився. Дружина Марія народила сина Юрія. Готувався до вступу в аспірантуру, забавляючись із сином. А сусіди вже тоді називали Георгія Євлампійовича професором.

Згодом, від Інституту фізики відокремився та утворився новий інститут – Інститут ядерних досліджень Академії Наук України. За профілем своєї наукової діяльності Георгій переводиться до аспірантури новоутвореного інституту та працює там на реакторі.

Роки роботи в Інституті ядерних досліджень були цікавими своїми науковими результатами, але не пройшли безслідно для організму. Коли дружина приїхала до Києва і побачила, які всі там бліді ходять, сказала: повертаймося до Луцька, і край. І тривожилася вона не дарма. Бо про «невеличкі» аварії на дослідному реакторі знало тоді лише вузьке коло посвячених людей. Це потім дізналися, зокрема, про

28 його колег, які захворіли після однієї такої аварії. Хоча тоді ніхто не пов'язував ці хвороби з опроміненням.

Сам Георгій Євлампійович часто розповідав: «Інколи ми самі легковажили, знімали дозиметри, щоб попрацювати довше, щоб швидше завершити дослідження. Бо якщо на дозиметрі була позначка, вища за допустиму норму, то нас не допускали до роботи».

Закінчив аспірантуру у 1972 році, у 1973 захистив кандидатську дисертацію, повернувся додому, на Волинь, і почав працювати старшим викладачем, доцентом (1975 р.) кафедри фізики Луцького державного педагогічного інституту імені Лесі Українки.

Напередодні Наказом Міністерства освіти за №229 від 29 вересня 1969 року на фізико-математичному факультеті була відкрита науково-дослідна лабораторія, де почалася робота у двох напрямках: квантова електроніка та фізика напівпровідників. Георгій Євлампійович долучається до роботи лабораторії та стає керівником одного з напрямків.

Наукові дослідження з фізики напівпровідників Георгій Євлампійович розвинув та створив власну наукову школу «Фізика структурних дефектів у напівпровідниках». Першими представниками цієї школи стали Микола Сергійович Богданюк, який як і Давидюк Г.Є. захистив дисертацію у Інституті ядерних досліджень НАН України, Василь Петрович Доскоч, який своє дослідження успішно захистив у Інституті фізики НАН України.

Через горнило лабораторії пройшли практично всі нинішні викладачі інституту. Оскільки створення університету дало змогу відкрити власну аспірантуру, ті люди, які пройшли школу Інституту фізики, Інституту фізики напівпровідників, Інституту ядерних досліджень НАН України мали змогу передавати свої знання та вміння. Що вони успішно і робили. А Георгій Євлампійович став першим керівником першого аспіранта нашого навчального закладу, яким став Володимир Васильович Божко.

Саме за керуванням Георгієм Євлампійовичем напрямком, лабораторія вперше, у 1973 році, заключила госпдоговір за тематикою дослідження радіаційних пошкоджень у напівпровідниках з Інститутом ядерних досліджень та військовим відомством. Керівником став Г.Є. Давидюк. Кошти за темою дали змогу купляти апаратуру, проводити дослідження на місці та суміщати їх з викладанням фізики студентам.

Після реорганізації інституту в 1992 році у Волинський державний університет імені Лесі Українки та утворення кафедри фізики твердого тіла, був обраний завідувачем цієї кафедри. Крім навчальної і адміністративної роботи, Георгій Євлампійович активно займається науковою діяльністю, про що свідчить значна кількість публікацій у республіканських і міжнародних виданнях. Він стає відомим вченим не тільки в Україні, а й у світі.

У 1995 році Георгій Євлампійович в Інституті фізики напівпровідників Національної академії наук України захистив докторську дисертацію на тему «Електричні і оптичні властивості монокристалів сульфїду кадмію з дефектами радіаційного походження».

У 1996 році йому присвоєне вчене звання професора. За вагомі наукові досягнення обирається членом Нью-Йоркської академії наук, згодом виграє міжнародний освітній грант, фінансований фондом Сороса (США).

Під керівництвом Георгія Євлампійовича у 1996 році у Волинському державному університеті імені Лесі Українки створюється перша спеціалізована вчена рада із захисту дисертацій зі спеціальності «01.04.10 – фізика напівпровідників та діелектриків». Певний час це була єдина кафедра в університеті, де працювала спеціалізована рада із захисту кандидатських, а згодом, і докторських дисертацій. Захищали дисертації у Луцьку як фізики Західної України так і зі столиці.

Георгій Євлампійович деякий час працював на посаді проректора з наукової роботи Волинського державного університету імені Лесі Українки, де проявив себе умілим керівником та організатором наукової діяльності університету. Він також був членом редколегії кількох наукових фахових журналів, зокрема, головним редактором серії «Фізичні науки» «Наукового вісника Волинського національного університету імені Лесі Українки», членом редколегії наукового журналу «Фізика і хімія твердого тіла» Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Сфера наукових інтересів Георгія Євлампійовича Давидюка охоплює питання фізики структурних дефектів у напівпровідникових матеріалах. До основних наукових досягнень належить установлення механізмів утворення радіаційних дефектів і їх взаємодії з найбільш важливими технологічними домішками у халькогенідних напівпровідниках групи $A^{II}B^{VI}$. Запропоновані несуперечливі моделі дефектних комплексів радіаційного походження, відповідальні за електричні й оптичні властивості бінарних сполук $A^{II}B^{VI}$ та механізми їх перебудови під впливом зовнішніх факторів. Досліджено вплив великих скупчень (кластерів) дефектів, утворених опроміненням напівпровідників важкими високоенергетичними частинками (протонами, реакторними нейтронами) на структурні особливості кристалічної ґратки бінарних напівпровідникових сполук і параметри електричних, оптичних та фотоелектричних явищ у напівпровідниках групи $A^{II}B^{VI}$. Встановлено механізми підпорогового дефектоутворення в монокристалах CdS. В останні роки очолював групу викладачів і аспірантів, що займалися вивченням нових тетраарних халькогенідних матеріалів з нелінійними властивостями.

Професор Давидюк Г.Є. був талановитим педагогом, його лекції з фундаментальних дисциплін, таких як «Загальна фізика», «Електродинаміка» та спецкурсів: «Нерівноважні процеси в напівпровідниках», «Структура і дефекти кристалів», «Радіаційна фізика», «Фізика поверхневих явищ в напівпровідниках» відрізнялися глибоким науковим змістом, чіткістю і логічністю структури, ясністю, доступністю викладення. Написані ним підручники і посібники до спецкурсів користуються популярністю у викладачів і студентів-фізиків багатьох університетів.

За більш, ніж 40 років наукової роботи Георгій Євлампійович підготував 11 кандидатів фізико-математичних наук, опублікував понад 280 наукових праць в українських і міжнародних фахових журналах, збірниках і виданнях, із них 10 монографій і навчальних посібників, чотири патенти на винахід.

Георгій Євлампійович Давидюк був невтомним популяризатором фізичної науки. Свого часу читав публічні лекції від товариства «Знання», працював зі здібними випусками шкіл області, проводив заняття з учителями фізики Волинської області на різних курсах і методичних об'єднаннях, читав лекції з фізики для вчителів шкіл, учнів, членів Малої академії наук. На усіх своїх лекціях Георгій Євлампійович виховував у молоді любов до рідної землі, спонукав вивчати правдиву історію України, яку сам чудово знав. Любив музику, літературу, живопис, але найбільшим захопленням його були мінерали. Його колекція є однією з найкращих приватних колекцій мінералів в Україні.

Георгій Євлампійович охоче спілкувався зі студентами, бо саме це: «додає мені адреналіну в кров; без живого спілкування життя стає пісним», – казав. Залишаючись у душі ліриком, він завжди вважав природничі науки (фізика, хімія, математика) стратегічними.

За вагомий внесок у становлення і розвиток фізичної науки і освіти на Волині Георгій Євлампійович нагороджений Нагрудними знаками Міністерства освіти та науки України «Відмінник освіти України», «Петро Могила»; йому присвоєне почесне звання «Заслужений діяч науки і техніки України»; відзначений Почесними грамотами Міністерства освіти та науки України й місцевих органів управління.

У пам'яті численних учнів, колег, усіх, кому пощастило співпрацювати з ним у навчальній, адміністративній, науковій, громадській роботі Георгій Євлампійович Давидюк залишиться талановитим, енциклопедично освіченим ученим, людиною з високими моральними принципами, мудрим, доброзичливим наставником.

Він був справжнім патріотом нашої країни, одним з улюблених віршів Георгія був «Любіть Україну» Володимира Сосюри.

13 січня 2013 р. на 69-му році життя після важкої хвороби пішов із життя доктор фізико-математичних наук, заслужений діяч науки і техніки України, голова спеціалізованої вченої ради із захисту докторських дисертацій, професор кафедри фізики твердого тіла та інформаційно-вимірювальних технологій нашого університету Георгій Євлампійович Давидюк.

Викладачі, працівники, студенти й усі його учні завжди будуть пам'ятати Георгія Євлампійовича Давидюка як невтомного педагога, видатного науковця та чудову людину. Але головне те, що живе та буде жити справа, у яку вдихнув життя Георгій Євлампійович.

Георгій Євлампійович завжди вказував на необхідність й важливість поєднання великої науково-дослідницької роботи з важкою та почесною педагогічною діяльністю, це та впровадження інноваційних методів навчання гарантує успішну діяльність колективу, його впевненість у майбутньому.

Він назавжди залишиться в серцях колег, усіх, кого звела з ним доля!!!

LUMINESCENT PROPERTIES OF TRIBORATE GLASS DOPED WITH Ag AND Eu

Adamiv V.T.¹, Dutchak U.M.², IzoT.A.², Teslyuk I.M.¹,
Luzechko A.P.³, Medvid I.I.³, Koflyuk I.M.³

¹ O.G. Vlokh Institute of Physical Optics, 23 Dragomanov St., Lviv, 79005, Ukraine. vol.adamiv@gmail.com
² Department of radiation therapy, Lviv Oncology Regional Medical and Diagnostic Center, 2a Yaroslav Hashek St., Lviv, 79058, Ukraine. anialu14@ukr.net
³ Department of Sensor and Semiconductor Electronics, Ivan Franko National University of Lviv, 107 Tarnavskogo St., 79017 Lviv, Ukraine. andriy.luzechko@lnu.edu.ua

Optically stimulated luminescence (OSL) is actively used for application in ionizing radiation dosimetry [1], especially in those areas related to medical practice [2]. The effectiveness of OSL application is highly dependent on the working body of the dosimeter. Considering that LiB_3O_5 has an effective atomic number of $Z_{\text{eff}} = 7.39$, which is the closest to $Z_{\text{eff}} = 7.42$ of human body tissue, doped lithium triborate LiB_3O_5 in the form of glass can be very promising for γ -dosimetry in medical practice during radiation therapy of patients with cancer.

The advantage of LiB_3O_5 glass is also the low cost of the starting reagents Li_2CO_3 and H_3BO_3 for the synthesis of the compound, a low melting point $T_{\text{melt}} = 1107$ K and, accordingly, lower glass boiling temperatures, which will ensure a lower cost of the manufactured dosimeters. However, for the practical use of LiB_3O_5 glass in dosimetry, it is necessary to find the most effective doping to ensure the maximum output of OSL. Our previous experience showed that Ag is quite an effective impurity for LiB_3O_5 glass [3]. Recently, the joint doping of Ag and Eu has been intensively studied as a valuable approach to increase the intensity of luminescence [4], in particular, in borate glasses [5]. Therefore, this work is devoted to the manufacture and research of LiB_3O_5 glass doped 0.1 mol.% Ag and 0.5 mol.% Eu by optical spectroscopy methods (absorption, excitation and emission spectra).

A solid-state reaction method was used to synthesize LiB_3O_5 . High-purity lithium carbonate Li_2CO_3 and boric acid H_3BO_3 are used as starting materials. Doping was carried out by adding AgNO_3 and Eu_2O_3 to this powder. The glass was prepared by fusing it in a Pt crucible in an air atmosphere at 1170 K and the melt was then poured onto a metal substrate at room temperature. The specimen of $6 \times 7 \times 1.5$ mm³ in size was produced. A 150 W pulsed xenon lamp was used as the excitation source. The spectral range of measurements in the spectrofluorometer mode ranged from 220 to 820 nm.

The results of the measurements are shown in Fig. 1.

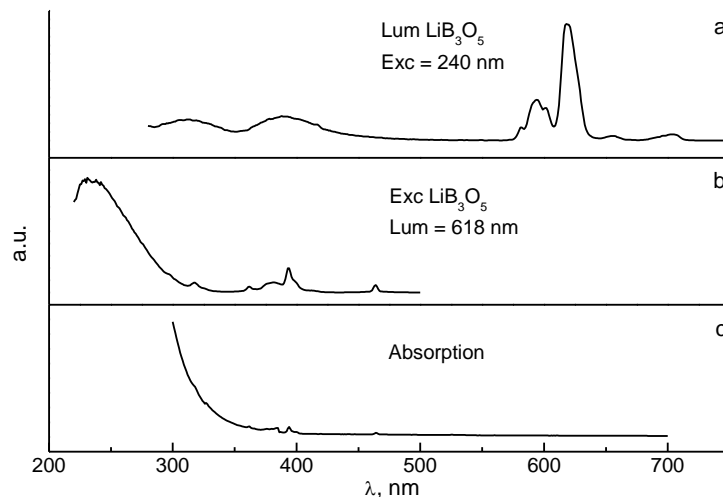


Fig. 1. Absorption (a), excitation (b), and emission (c) spectra upon excitation by 240 nm light.

As can be seen from Fig. 1, the absorption spectrum (curve a) of $\text{LiB}_3\text{O}_5:0.1$ Ag, 0.5 Eu (mol.%) in the region of 300 – 700 nm has a typical appearance for LiB_3O_5 glass, where several sharp peaks associated with electronic transitions f-shells of the Eu^{3+} ion. The absorption of Ag^+ ions is in the far UV region, so it is absent in this spectrum. However, in the excitation spectrum (Fig. 1, curve b) of the emission of Eu^{3+} ions at 618 nm, the influence of Ag^+ ions is very clearly manifested by a broad band

in the range of 220 – 300 nm and a weak band at 370 – 400 nm. In the emission spectrum (Fig. 1, c), the Ag^+ admixture causes the appearance of a new emission band around 310 nm.

Based on the obtained experimental results, the following conclusions can be drawn. The silver impurity enters the LiB_3O_5 glass lattice exclusively in the form of ions, and europium in the form of Eu^{3+} ($4f^6$, 7F_0) and form luminescence centers with a characteristic optical spectrum. Accordingly, the emission spectra of $\text{LiB}_3\text{O}_5:\text{Eu},\text{Ag}$ glass reveal emission bands that correspond to transitions $^5D_0 \rightarrow ^7F_J$ ($J = 0 - 6$) of Eu^{3+} and $4d^{10} - 4d^95s^1 \text{Ag}^+$ ions.

In order to check the suitability of $\text{LiB}_3\text{O}_5:\text{Eu},\text{Ag}$ glass for OSL γ -dosimetry, a trial experiment was conducted to record OSL spectra from samples of LiB_3O_5 glass doped 0.1 mol.% Ag and 0.5 mol.% Eu after γ -irradiation of 1.5 Gy and 3.0 Gy doses using a remote γ -therapy apparatus “TERAGAM” Co(60) at the Lviv Regional Oncology Treatment and Diagnostic Center (Fig. 2).

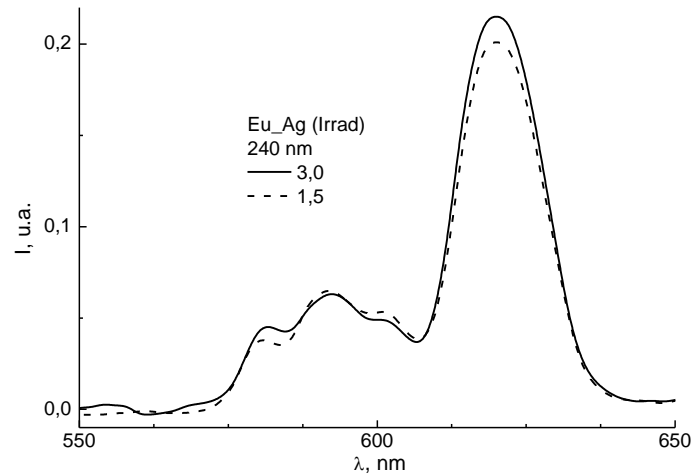


Fig. 2. OSL spectra of LiB_3O_5 glass doped Ag (0.1 mol.%) and Eu (0.5 mol.%) after γ -irradiation of 1.5 Gy and 3.0 Gy doses and under excitation by 240 nm light.

As can be seen from Fig. 2, the intensity of OSL radiation clearly increases with an increase in the radiation dose. Therefore, $\text{LiB}_3\text{O}_5:\text{Eu},\text{Ag}$ glass has the prospect of use in OSL dosimetry, but requires optimization of the ratio of Eu and Ag concentrations.

Acknowledgment

This work was supported at the EURIZON project #ID70, which is funded by the European Union under grant agreement No.871072.

References

1. E.G. Yukihara, S.W.S. McKeever, and M.S. Akselrod, “State of the art: Optically stimulated luminescence dosimetry – Frontiers of future research,” *Radiat. Meas.* 71, 15-24 (2014).
2. E.G. Yukihara, and T. Kron, “Applications of optically stimulated luminescence in medical dosimetry,” *Radiat. Prot. Dosim.* 192(2), 122-138 (2020).
3. Volodymyr Adamiv, Yaroslav Burak, Natalia Volodko, Ulyana Dutchak, Taras Izo, Ihor Teslyuk, and Andriy Luchechko, “Effect of gamma-irradiation on the photoluminescence of silver-doped lithium triborate glass” *App. Opt.* 63(10), pp. 2630-2635 (2024)
4. O.L. Malta, P.A. Santa Cruz, G.F. De Sá, F. Auzel, Fluorescence enhancement induced by the presence of small silver particles in Eu^{3+} doped materials, *J. Lumin.* 33, pp. 261-272 (1985).
5. I.I. Kindrat, B.V. Padlyak, B. Kukliński, A. Drzewiecki, V.T. Adamiv “Enhancement of the Eu^{3+} luminescence in $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ glasses co-doped with Eu and Ag”, *J. Lumin.* 204, pp. 122-129 (2018).

PHOTON EFFICIENCY: RETROSPECTIVE AND PERSPECTIVE

Petro Trokhimchuck

Anatolii Svidzinskiy Department of Theoretical and Computer Physics,

Lesya Ukrainka Volyn' National University,

Lutsk, 43025, Ukraine

Trokhimchuck.Petro@vnu.edu.ua, trope1650@gmail.com

Concept of the photochemical efficiency was introduced by J. Stark and A. Einstein [1] for the equilibrium case. But it may be developed in Nonlinear Optics [2], Relaxed Optics [3] and chemistry [2]. To analyze the efficiency of using absorbed light, we introduced the concept of photon efficiency, which is more general than the Stark-Einstein photochemical efficiency [1– 3].

In general, it makes sense to talk about differential and integral photon efficiency. The differential photon efficiency is introduced at the microlevel for each act of scattering (absorption) of a photon by a medium; integral at the macro level and characterizes macroscopic changes in the properties of the medium or radiated or both radiation and the medium. Appropriate models and theories should be created for each specific case.

According to the level of complexity and scope, photon efficiency can be classified as follows [3]:

1. Radiative photon efficiency.
2. Non-radiative photon efficiency.
3. Mixed photon efficiency.
4. Cascade radiative photon efficiency.
5. Cascade nonradiative photon efficiency.
6. Cascade mixed photon efficiency.

An example of the radiative photon efficiency is the optical pumping of lasers [2, 3], and the nonradiative efficiency is photochemical reactions [2]. The mixed photon efficiency characterizes the optical pumping of a laser with heating of the active medium and autooscillative chemical reactions of Belousov-Zhabotinskiy type) [3].

Nonlinear optical phenomena are characterized by cascade photon radiative efficiency [3]. Chain chemical reactions [3] and some chains of relaxed-optical processes [3] are represented cascade photon non-radiative efficiency. A number of chains of relaxed-optical processes are characterized by a cascade mixed photon efficiency [3]. An example of a mixed optical-electronic system is a photomultiplier tube [3]. It is an electrovacuum device in which the electron flow emitted by a photocathode under the action of optical radiation (photocurrent) is amplified in the multiplier system as a result of secondary electron emission; the current in the anode circuit (collector of secondary electrons) significantly exceeds the initial photocurrent (usually 10^5 times or more). Only first stage of cascade has optical nature.

The integral photon efficiency is connected associated with the direct transformation of the photon flux into photochemical transformations in the irradiated material. It is directly related to differential efficiency. But there is one subtlety in the absorption of radiation by unstable or metastable centers (disordered and amorphous media): the exposure time does not play a big role. At the same time, the radiation saturation mode is of great importance for crystals. For radiative relaxation we have luminescence, generation of laser radiation and various nonlinear optical phenomena; for nonradiative relaxation – relaxed-optical phenomena (phase transformations of the irradiated medium).

Stark-Einstein's law – one quantum of absorbed light causes one elementary chemical reaction [2]. The law allows establishing the relationship between the absorbed energy and the degree of transformation of matter.

It should be noted that in addition to single-photon ionization processes, there can be multiphoton ionization processes and associated dissociation. In this case, the Stark-Einstein law should be corrected.

Now we can formulate the *generalized Stark-Einstein law* [3]: to break (ionize) a certain state, the total energy of a certain number of photons must be greater than or equal to the energy of the excited bond.

The mathematical form of writing for three absorption modes can be represented for the differential photon efficiency δ in the following form [3]:

- 1) $\delta < 1$ for multi photon absorption; (1)
- 2) $\delta = 1$ for one-photon absorption; (2)
- 3) $\delta > 1$ for fractional photon absorption. (3)

Roughly speaking, these three conditions are formalized presentation of generalized Stark-Einstein law.

For the estimation the differential photon efficiency of using laser radiation for photochemical irreversible processes for fractional photon absorption we can use next formula for the determination of number of broken chemical bonds per one photon n [3]

$$n = 2 \ln \frac{h\nu}{E_a}, \quad (4)$$

where $h\nu$ – photon energy; E_a – energy of activation (broken) of corresponding bond.

So, for the case of the irradiation *InSb* by Ruby laser pulses (photon energy 1.78 eV) we have for the first bond of two-dimensional lattice of *InSb* ($E_{1InSb} = 0.18$ eV) [3]. These crystals are direct-gap, so the band gap is equal to the energy of the minimum chemical bond [3]. Therefore, $n_{InSb} \sim$

4.6 bonds/pulse. For case of irradiation *Si* ($E_a \sim 1.6$ eV) by irradiation of eximer laser pulses (photon energy 5 eV) we have $n_{Si} \sim 2.3$ bonds/pulse [3]. These conditions allow increasing the lifetime of excited states and therefore the heating of irradiated matter may be negligible compared to direct photoionization, including phase transformations of the irradiated material.

Formula (3) has large value for the crystals. For the polymers, glasses and amorphous media this condition may be represented as [3, 4]

$$h\nu > E_a. \quad (5).$$

For the determination the differential photochemical efficiency in addition to formulas (4) and (5), the excitation saturation procedure is of great importance.

In other words, for successive n -photon absorption for the next absorption event, the medium must be in the excited state that was obtained during previous absorptions.

The integral photochemical (photon) efficiency [3] is connected associated with the direct transformation of the photon flux into photochemical transformations in the irradiated material. It is directly related to differential efficiency. But there is one subtlety in the absorption of radiation by unstable or metastable centers (disordered and amorphous media): the exposure time does not play a big role. At the same time, the radiation saturation mode is of great importance for crystals. For radiative relaxation we have luminescence, generation of laser radiation and various non-linear optical phenomena; for nonradiative relaxation – relaxed-optical phenomena (phase transformations of the irradiated medium). Integral photon efficiency has cascade nature [3].

To increase the photon efficiency, the space-time conditions of irradiation also play an important role. For Nonlinear Optics, they are closely related to coherence and are called phase-matching conditions [2, 3]; for Relaxed Optics, the concept of coherent structures can be used [3].

Main applications of this concept in modern science bare discussed and analyzed in [3, 4].

1. Einstein A. Deduction thermodynamique de la loi de l'équivalence photochimique.// J. Phys., ser. 5, vol. 111, 1913. – P. 277-282 (in French)
2. Wayne R. P. Principles and Applications of Photochemistry. Oxford University Press, 1988.
3. Trokhimchuck P. P. Photon Efficiency: Retrospective and Perspective. IJARPS, vol. 9, is, 5, 2022. – P. 1-14.

MAIN PECULIARITIES OF THE CREATION AND DEVELOPMENT OF RELAXED OPTICS

Trokhimchuck Petro P.

*Anatolii Svidzinskiy Department of Theoretical and Computer Physics,
Lesya Ukrainka Volyn' National University,
Lutsk, 43025, Ukraine*

Trokhimchuck.Petro@vnu.edu.ua, trope1650@gmail.com

Relaxed Optics is a branch of physics that was created to describe the processes of interaction of laser radiation from the point of view of relaxation of the primary optical excitations of the medium [1-9]. The need for its creation is due to the development of laser technologies. Roughly speaking, it is a synthesis of solid state radiation physics, physical chemistry, physics of critical phenomena, physical optics and quantum electronics into a single system [1-4].

The main concepts of Relaxed Optics: kinetic-dynamic, electromagnetic and coherent have a complex (cascade) structure. Because of this, the main theories and models of relaxation optics have a cascade (chain) structure. Moreover, the elements of the cascade themselves can belong to different sections of physics, which are included in relaxation optics. The photoeffect model adapted in this way includes photoionization processes and thermodynamic relaxation. Depending on the conditions of light absorption (on stable or unstable centers), these two processes can proceed in different directions or in the same direction.

To explain the microscopic nature of the formation of stable donor centers in antimonide and indium arsenide, a cascade model of the step-by-step excitation of the corresponding chemical bonds in the excitation saturation regime was constructed. The calculations were based on the two-dimensional lattice of sphalerite. A phenomenological chain of relaxation times was also constructed. The set of these models allowed to explain the formation processes of laser-induced donor centers in indium antimonide and indium arsenide? Including the processes of reabsorption and reradiation.

A cascade model of excitation of the corresponding number of coordination numbers was used for silicon and germanium. The basis was the phase diagrams of silicon and germanium. This made it possible to explain the reason for the emergence of hedgehog-like laser-induced structures for these materials. The near-surface enrichment of titanium with a hexagonal phase during laser irradiation was also explained.

Cascade processes of a slightly different type lead to the optical breakdown of a substance when it is irradiated with focused pulsed laser radiation. In this case, the following chain of processes takes place: diffraction stratification of focused radiation; generation of optically-induced Cherenkov radiation, whose generating cones are perpendicular to the generating cones of focusing; generation of Cherenkov radiation in each cone; interference of Cherenkov radiation; the interference maxima of the short-wavelength part of Cherenkov radiation correspond to the observed cascade pattern of optical breakdown. Moreover, its geometry depends on the wavelength of laser irradiation.

1. Trokhimchuck P. P. Foundation of Relaxed Optics. Lutsk: Lesya Ukrainka Volyn University Press "Vezha", 2006. 294 p.
2. Trokhimchuck P. P. Foundations of Relaxed Optics. Lutsk: Lesya Ukrainka Volyn University Press "Vezha", 2011. 627 p.
3. Trokhimchuck P. P. Nonlinear and Relaxed Optical Processes. Problems of interactions. Lutsk: Vezha-Print, 2013. 280 p.
4. Trokhimchuck P. P. Relaxed Optics: Realities and Perspectives. Saarbrücken: Lambert Academic Press, 2020. 249 p.
5. Trokhimchuck P. P. Relaxed Optics: Modelling and Discussions. Saarbrücken: Lambert Academic Press, 2020. 249 p.
6. Trokhimchuck P. P. Relaxed Optics: Modelling and Discussions 2. Saarbrücken-Cisinau: Lambert Academic Press, 2022. 210 p.
7. Trokhimchuck P. P. Relaxed Optics: Modelling and Discussions 2. New Delhi: AkiNik Publications, 2022. 205 p.
8. Trokhimchuck P. P. Relaxed Optics: Modelling and Discussions 3. Saarbrücken-Cisinau: Lambert Academic Press, 2024. 256 p.
9. Trokhimchuck P. P. Relaxed Optics: Modelling and Discussions 3. New Dehli: Bright Sky Publishers, 2024. 242 p.

VISUALIZATION OF POSSIBLE MAXIMA OF ACOUSTOOPTICAL AND NON-LINEAR OPTICAL EFFECTS IN CRYSTALS BY EXTREME SURFACES TECHNIQUE

O.A. Buryy¹, D.O. Shulha², Z.O. Kohut³, A.S. Ansrushchak⁴

¹*Semiconductor Electronics Department, Lviv Polytechnic National University, oleh.a.buryi@lpnu.ua*

²*Department of Applied Physics and Nanomaterials Science, Lviv Polytechnic National University, dmytro.o.shulha@lpnu.ua*

³*Department of Applied Physics and Nanomaterials Science, Lviv Polytechnic National University, zinoviy.o.kohut@lpnu.ua*

⁴*Department of Applied Physics and Nanomaterials Science, Lviv Polytechnic National University, anatolii.s.andrushchak@lpnu.ua*

The problem of determination the directions in which the value of a certain effect in crystalline media has got a maximum or minimum is one of the general theoretical problems of crystal physics. Such problems are solved, as a rule, by the method of undetermined Lagrange multipliers [1]. In the case of sufficiently complex effects, however, it does not allow to obtain analytical expressions for the parameters describing the effect. In addition, determination the direction in which some parameter is maximal/minimal is not yet a sufficient result from an applied point of view. It should be found together with how smoothly the parameter changes around the extremum, and if the direction corresponding to the extremum is difficult enough for practical implementation, then alternative extrema should be indicated that are more convenient from a technological point of view.

On the other hand, the representation of tensors (pseudotensors) by means of indicative surfaces is known, whose equation in the general case is [1,2]:

$$r(\theta, \varphi) = T_{i_1 \dots i_p} n_{i_1} \dots n_{i_p}, \quad (1)$$

where r is radius-vector of the indicative surface, θ, φ are the angles of spherical coordinate system, $T_{i_1 \dots i_p}$ are the components of the tensor T of rank p , $r(\theta, \varphi) = T_{i_1 \dots i_p} n_{i_1} \dots n_{i_p}$, $n_{i_1} \dots n_{i_p}$, $i_1 \dots i_p = 1, 2, 3$ are the components of the unit vector which direction is determined by the angles θ, φ , $n_1 = \sin \theta \cos \varphi$, $n_2 = \sin \theta \sin \varphi$, $n_3 = \cos \theta$. In the case of symmetric tensors of the second rank, determining the maximum or minimum magnitudes of the effects described by the given tensor T is not complex: they take place in the directions corresponding to the main axes of the tensor. A number of works are known (see, e.g. [2-4]), in which this approach is used to represent the magnitude of more complex effects, but with the imposition of some additional conditions – e.g., when considering the acousto-optic effect, a certain ratio (as a rule, parallelism or perpendicularity) of the directions of light and acoustic waves (or their polarization). The shape of the indicative surface allows to visually estimate how significantly the magnitude of the effect will change when the direction of considered factor (wave, electrical field, etc.) deviates from the determined one. However, the limitation of consideration to orthogonal geometries leaves open the question of determination the optimal geometry of the effect, which, generally speaking, can be non-orthogonal.

The method proposed in a series of works [5-8] is a further development of this approach, but to ensure the generality of the analysis, in particular, taking into account all possible geometries, it is additionally supplemented by the search for the extremum of the investigated effect. The corresponding geometric representation in this case is the surface (the extreme one in accordance with the principle of its construction). The aim of this work is a systematic presentation of the main ideas underlying the method of extreme surfaces.

Construction of an extreme surface is generally carried out on the basis of the following principles. Let Δ is some parameter of the crystal, depending on the directions of several factors present in the problem – light or acoustic waves, applied forces, currents, etc. Since each of these directions can be

specified by the angles θ_i , φ_i (i is the number of the factor), the value Δ is obviously a function of the angles, $\Delta \equiv \Delta(\theta_1, \varphi_1, \dots, \theta_N, \varphi_N)$, where N is the number of factors. For a graphical representation of the spatial dependence of the function Δ , it is possible to postulate certain relations between the angles $\theta_1, \varphi_1, \dots, \theta_N, \varphi_N$ so that only one pair of them (θ_k, φ_k) will be independent, after which the dependence $\Delta(\theta_k, \varphi_k)$ can be constructed. It is on this principle that indicative surfaces are constructed in the papers cited above. However, it is possible to go another way: for each pair of angles (θ_k, φ_k) determine the following angle values $\theta_1, \varphi_1, \dots, \theta_{k-1}, \varphi_{k-1}, \theta_{k+1}, \varphi_{k+1}, \dots, \theta_N, \varphi_N$ which ensure the maximum (for certainty) of Δ at the given values of (θ_k, φ_k) . Unlike the previous one, we will denote this function by $\Delta_{max}(\theta_k, \varphi_k)$, emphasizing that the value of this function is obtained by finding the maxima on all angles, excluding θ_k, φ_k . The graphical representation of the dependence $\Delta_{max}(\theta_k, \varphi_k)$ is the extreme surface. Analyzing this surface (or, equivalently, the obtained data set), we can determine the global maximum Δ_{max}^{extr} , that is, the value of the objective function, the largest within the obtained set of partial maxima Δ_{max} . For the construction of an extreme surface, only the spatial orientations of the considered factors are important, not their absolute values, so the extreme surface can be considered as a characteristic of the material, similar to the indicative surfaces that reflect the anisotropy and symmetry of the crystal.

Regarding the practical application of the method, the following aspects should be noted. The advantage of extreme surfaces in comparison with indicative ones is the representation of all maxima of the effect, which makes it possible to unambiguously estimate the maximally achievable (under other constant conditions) magnitude of the effect and the corresponding optimal geometry of interaction. At the same time, the indicative surface is better tool for analyzing the effects of possible deviations of the directions of the considered factors from the given ones. Indeed, according to the principle of its construction, each point of the extreme surface represents the result of optimization; so, when deviating from a given direction (a certain point on the surface), one get to another point, which represents the magnitude of the effect obtained ‘in the best case’. The assessment of possible deviations in the magnitude of the effect carried out in this way will most likely be underestimated. However, a similar assessment made with the help of an indicative surface will give a result closer to the realistic one. Therefore, to ensure a more complete analysis of the optimal geometry of the effect, it is advisable to conduct research in two stages: 1) determination of the global maximum and optimal orientations based on the analysis of extreme surfaces; 2) construction of indicative surfaces for the optimal orientation revealed at the first stage, determination of possible changes in the value of the effect when the direction of the factor (e.g. light propagation direction) deviates from the specified one. Certainly, the determination of the optimal interaction geometry can, in principle, be implemented using known optimization methods, specifying as optimization parameters the angles that determine the directions of all factors. However, the information carried by the extreme surface is wider than that obtained as a result of such optimization. In particular, the extreme surface allows to identify not only the global maximum, but also to easily choose alternative directions that may be more convenient from a design or technological point of view.

Using the method of extreme surfaces, a number of crystal physical effects were analyzed, in particular, acousto-optical and non-linear optical ones (second harmonic generation (SHG), sum and difference frequencies generation). Examples of extreme surfaces for the case of SHG in some crystals are shown in Fig. 1. In this case the function Δ is an efficiency of SHG (more precisely, the value proportional to it with the dimension of pm^2/V^2).

In the cases of acousto-optical and non-linear optical effects, there are the additional conditions connecting the wave vectors of the incident, diffracted, and acoustic waves (for the acousto-optic effect) or the wave vectors of the interacting waves (for non-linear optical effects). Such conditions (the momentum conservation law), however, does not complicate the optimization process, but, on the contrary, are its basis, as it allows to reduce the area in which the search for optimal orientations of the waves is carried out.

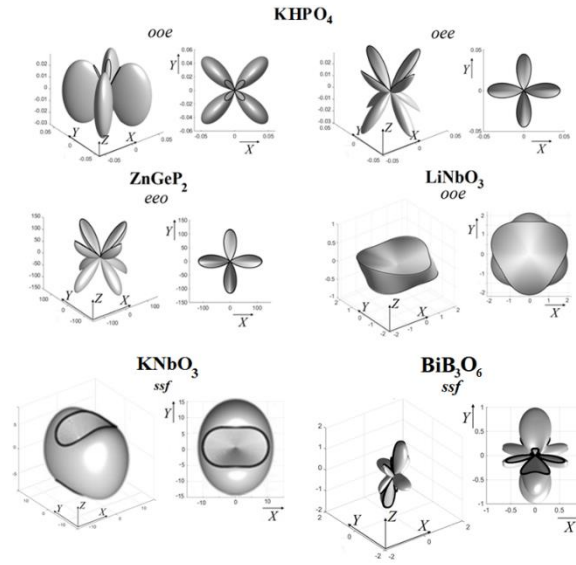


Fig. 1. Extreme surfaces for second harmonic generation in uniaxial (KH_2PO_4 , ZnGeP_2 , LiNbO_3) and biaxial (KNbO_3 , BiB_3O_6) crystals. The types of phase matching are indicated in accordance with [9]. All surfaces correspond to the case of vector phase matching, when the wave propagation directions do not coincide; black lines correspond to scalar phase matching. The points of the surfaces furthest from the origin correspond to the maximum effect.

Using this approach, for the first time, it was possible to identify the optimal geometries of the acousto-optic effect in crystals, taking into account the non-orthogonal geometries and the condition of momentum conservation, as well as to determine the global maxima of non-linear optical effects in crystals for the general case of vector phase matching.

This research has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No 778156 and from Ministry of Education and Science of Ukraine in the frames of 'Nanoelectronics'(0123U101695).

References

1. Yu. Sirotn, M. Shaskolskaja, Fundamentals of crystal physics. Imported Pubn, Moscow, 1983.
2. R. Vlokh, O. Mys, O. Vlokh, Indicative Surfaces for Crystal Optical Effects, Ukrainian Journal of Physical Optics, 2005, V. 6, pp. 150-154.
3. O. Vlokh, B. Mytsyk, A. Andrushchak, Ya. Pryriz, Spatial distribution of piezoinduced change in the optical pathlength in lithium niobate crystals, Cryst. Rep., 2000, V. 45, pp. 138-144.
4. B. Mytsyk, V. Stadnyk, N. Demyanyshyn, Ya. Kost, P. Shchepanskyi, Photoelasticity of ammonium sulfate crystals, Opt. Mat., 2019, V. 88, pp. 723-728.
5. O. Buryy, A. Andrushchak, O. Kushnir, S. Ubizskii, D. Vynnyk, O. Yurkevych, A. Larchenko, K. Chaban, O. Gotra, A. Kityk, Method of extreme surfaces for optimizing the geometry of acousto-optic interactions in crystalline materials: Example of LiNbO_3 crystals, J. Appl. Phys., 2013, V. 46, 083103, 12 pages.
6. A. Andrushchak, O. Buryy, N. Andrushchak, Z. Hotra, O. Sushynskyi, G.Singh, V. Janyani, I.Kityk, General method of extreme surfaces for geometry optimization of the linear electro-optic effect on an example of $\text{LiNbO}_3\text{:MgO}$ crystals, Appl. Opt., 2017, V. 56, pp. 6255-6262.
7. N. Andrushchak, O. Buryy, A. Danylov, A. Andrushchak, B. Sahraoui, The optimal vector phase matching conditions in crystalline materials determined by extreme surfaces method: Example of uniaxial nonlinear crystals, Opt. Mat., 2021, V. 120, 111420, 9 pages.

STRUCTURE AND PHASE TRANSITION IN VANADIUM OXIDE THIN FILMS STUDIED BY RAMAN SPECTROSCOPY

*O.F. Isaieva, V.M. Dzhagan, V.O. Yukhymchuk, O.A. Stadnik, Z.V. Maksimenko,
O.V. Dubikovskiy, B.M. Romanyuk, M.Ya. Valakh*

V. Lashkaryov Institute of Semiconductors Physics, NAS of Ukraine, 03028 Kyiv, Ukraine, E-mail:
v.yukhymchuk@gmail.com

A reversible semiconductor-to-metal phase transition (SMT) in crystalline vanadium dioxide (VO₂) around 68 °C has stimulated numerous studies of this material for improving the parameters of SMT. The SMT is accompanied by a sharp change in electrical resistance by 4-6 orders of magnitude and by 2-3 orders of magnitude in optical transmission in the infrared region. In particular, the relatively high transparency of VO₂ films in the semiconductor state is sharply reduced due to the high reflection coefficient of VO₂ films in the metallic state. Owing to this, VO₂ thin films are very promising for fast thermochromic switching in smart windows, thermal sensors, and various other applications.

For practical use, it is desirable to reduce the temperature of the phase transition without affecting other important parameters of the VO₂ film. One of the problems with obtaining the film with desired characteristics is the multivalence of vanadium, which can lead to the formation and coexistence of several other oxides, depending strongly on the technological conditions, such as V₆O₁₃, V₃O₇, V₄O₉, and V₂O₅. The physical mechanism of the SMT remains debatable, and the effect of minor inclusions of other oxides on the SMT transition of the VO₂ phase needs to be studied in more detail. Raman spectroscopy is one of the most frequently used experimental techniques for the investigation of vanadium oxides in general and SMT in VO₂ in particular. However, certain ambiguities in the attribution of Raman bands to different oxides still exist.

In this work, we used magnetron deposition for obtaining thin films of vanadium oxide on silicon or quartz substrates [1,2], with varying the film thickness, from 100 to 200 nm, discharge current in argon plasma, from 0.05 to 0.09 A, temperature of the substrate during growth, 200 to 230 °C, as well as temperature and duration of post-growth annealing in inert atmosphere (250 to 450 °C and 10 to 30 minutes, respectively). In order to resolve the mentioned ambiguities in the assignment of the Raman peaks to different oxides, a series of reference film samples was obtained by annealing in air.

The work was supported by project No. 4.4/23-P of the program "Support for the development of priority areas of scientific research" for 2023-2024.

List of references

1. P.M. Lytvyn, V.M. Dzhagan, M.Ya. Valakh, A.A. Korchovyi, O.F. Isaieva, O.A. Stadnik, O.A. Kulbachynskiy, O.Yo. Gudymenko, B.M. Romanyuk, V.P. Melnik Nanomechanical properties of polycrystalline vanadium oxide thin films of different phase composition. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics* 26 (2023) 388-397.
2. V.M. Dzhagan, M. Ya Valakh, O.F. Isaieva, V.O. Yukhymchuk, O.A. Stadnik, O. Yo Gudymenko, P.M. Lytvyn, O.A. Kulbachynskiy, V.S. Yefanov, B.M. Romanyuk, V.P. Melnik Raman fingerprints of different vanadium oxides as impurity phases in VO₂ films. *Optical Materials* 148 (2024) 114894.

SERS-SUBSTRATES WITH SELF-ENRICHMENT OF ANALYTE IN THE HOT-SPOTS

**Mazur N.V.¹, Kapush O.A.¹, Dzhahan V.V.², Gule E.G.¹, Yefanov V.S.¹, Virko S.V.¹,
Yukhymchuk V.O.¹, Dzhagan V.M.^{1,2}**

¹ *V. Lashkaryov Institute of Semiconductors Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine. E-mail: v.yukhymchuk@gmail.com*

² *Physics Department, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine,*

Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) has been increasingly gaining popularity as a promising spectroscopic tool for detection and identification of trace amounts of various molecular species [1]. The level of sensitivity claimed by many groups over a wide range of types of substrates and analyte compounds is sufficiently high for real-life application of this technique. Nevertheless, the wide commercialization of the SERS-based sensing technologies requires good performance at affordable fabrication costs of the sensing substrate. At the same time, the best performance is usually reported for SERS substrates fabricated by rather sophisticated routes. In addition, one of the important issues is reproducibility of the enhancement produced by the substrate. One of the conditions of achieving reproducible results is homogeneous distribution of the analyte over the substrate surface. On the other hand, the condition of obtaining high enhancement is localization of as much as possible analyte in the so-called “hot spots” – nanometer-scale space regions of high concentration of electric field between metal nanostructures [1,2].

In this work an original type of very affordable substrates is proposed that combines the possibility of self-localization of the analyte (deposited from solution) in the hot spots that are regularly arranged over the substrate surface. The basis of the substrate are self-assembled layers of highly monodisperse silica nanoparticles, synthesized by a facile and scalable route in water. The coverage of this nanoparticle layer with thin layer of gold or silver by thermal evaporation or some other methods creates numerous hot-spots in the places between silica particles. The efficiency of the developed substrates is demonstrated for several different types of analytes, in particular common dye molecules and small molecules structurally resembling common explosives.

This work was funded by grant of the NAS of Ukraine to research laboratories/groups of young scientists № 06/01-2024(5).

List of references

1. C. Muehlethaler, M. Leona, J. R. Lombardi. Review of surface enhanced Raman scattering applications in forensic science // *Anal. Chem.* 2016, 88, 152–169.
2. V. Dzhagan, N. Mazur, O. Kapush, et al. Self-organized SERS substrates with efficient analyte enrichment in the hot spots // *ACS Omega* 9, 2024, 4819–4830.

ПЛАЗМОННІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОЧАСТИНОК СРІБЛА РІЗНОЇ ГЕОМЕТРІЇ

Булавінець Богдан, Стахіра Павло, Булавінець Тетяна, Яремчук Ірина

Кафедра електронної інженерії, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С.Бандери, 12, 79013, Львів

e-mail: tetiana.o.bulavinets@lpnu.ua

Розуміння принципів взаємодії електромагнітного випромінювання із плазмонними наноструктурами є важливим для їх ефективного практичного використання в електроніці, оскільки дає знання про вплив світлової хвилі на плазмонні властивості нанооб'єктів. Особливістю такої взаємодії є можливість утворення поверхневих зарядових збуджень хвиль, властивості яких істотно відрізняються від властивостей хвиль, що поширюються у вільному просторі. Умови збудження локалізованих поверхневих плазмонних резонансів визначають оптичні властивості плазмонних наноструктур. Зокрема, виникнення плазмонного резонансу призводить до значного підсилення поглинання та розсіювання електромагнітного випромінювання наночастинками, а також до локального збільшення амплітуди поля електромагнітної хвилі поблизу поверхні та в поверхневих шарах наноструктур [1]. Відомо, що змінюючи геометричні параметри наночастинок можна керувати плазмонними резонансами та зміщувати їх положення у бажану спектральну область.

У цій роботі проведено дослідження зміни оптичного відгуку наночастинок срібла при зміні їх геометричної форми. Для цього було проведено синтез та характеристизацію наночастинок срібла за допомогою лазерного випромінювання видимого діапазону та модифікацію їх форми з використанням світлових потоків.

Синтез наночастинок срібла проведено шляхом фотостимульованого відновлення іонів срібла з водного розчину AgNO_3 (99,8%). В якості речовини-стабілізатора обрано тринатрієвий цитрат $\text{Na}_3\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7$ (99,5%). В процесі синтезу в якості відновника використано неперервне лазерне випромінювання з довжиною хвилі 445 нм та потужністю 380 мВт. В результаті було отримано сферичні наночастинки срібла розміром 32 нм та максимумом поглинання на довжині хвилі 420 нм. Розмір частинок та морфологія наноструктур визначали методом електронної мікроскопії з використанням електронного мікроскопа JEOL-1011. Оптичні спектри поглинання вимірювали спектрофотометрами ULAB 102. Для забезпечення процесу модифікації форми наночастинок срібла було проведено їх опромінення випромінюванням з довжинами хвиль 465, 525 та 623 нм протягом 4 діб. При опромінюванні LED з довжиною хвилі 635 нм колір колоїду змінюється від характерного жовтого до зеленого. При опромінюванні LED 525 нм спостерігається зміна забарвлення колоїду від жовтого до синього та при опромінюванні LED 465 нм - від жовтого до помаранчевого. Зміна кольору колоїду вказує на зміну морфології наночастинок срібла від сфери до нанотрикутників та нанодекаєдрів [2]. Результати дослідження показали, що отримані трикутні наночастинки характеризуються середньою довжиною ребра близько 98 нм при опроміненні довжиною хвилі 525 нм і близько 155 нм при опроміненні 623 нм. Цікаво, що опромінення наночастинок Ag світлодіодами 525 та 623 нм призвело до утворення інтенсивних піків поглинання у ближньому ІЧ діапазоні (866 та 934 нм відповідно). Отже, результати дослідження показують, що світло є ефективним та перспективним інструментом, який може бути використаний не лише для синтезу, але й для модифікації оптичних та геометричних параметрів наноструктур.

1. Alrahili, M. (2024). Single Silver Nanoparticles: Local Refractive Index Response to Localized Surface Plasmon Resonance and Molar Attenuation Coefficient. *Colloid Journal*, 1-15.
2. Alhajj, M., Abd Aziz, M. S., Salim, A. A., Sharma, S., Kamaruddin, W. H. A., & Ghoshal, S. K. (2023). Customization of structure, morphology and optical characteristics of silver and copper nanoparticles: Role of laser fluence tuning. *Applied Surface Science*, 614, 156176.

ПЛАЗМОННІ ВЛАСТИВОСТІ МАСИВУ СФЕРИЧНИХ НАНОЧАСТИНОК ЗОЛОТА

Булавінець Тетяна, Фітьо Володимир, Яцків Віталій, Яремчук Ірина

*Кафедра електронної інженерії, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С.Бандери, 12,
79013, Львів*

e-mail: tetiana.o.bulavinets@lpnu.ua

Нещодавні дослідження масивів наночастинок з різною геометрією показали, що їх дифракційний зв'язок відіграє значну роль у формуванні властивостей ближнього та дальнього поля шляхом підвищення ефективності зв'язку з локалізованими поверхневими плазмонними резонансами (ЛППР) [1]. Періодичне розташування плазмонних наночастинок впливає на їхню взаємодію з електромагнітними хвилями та є ефективним підходом до налаштування оптичних властивостей через контроль їх морфології. Збуджені електромагнітними хвилями коливання електронів на поверхні металевих наночастинок призводить до надзвичайно сильного розсіювання та поглинання світла, що супроводжується значно посиленням ближнім полем через високу локалізацію світлової енергії в наномасштабі. Індивідуальні локалізовані моди ЛППР зазнають впливу, коли металеві наночастинок знаходяться в безпосередній близькості, і в результаті їх електричні ближні поля можуть перекриватися, створюючи новий гібридний режим. Такий плазмонний зв'язок у періодичних масивах наночастинок має важливе значення для їх практичного застосування, оскільки оптичні властивості наночастинок у масиві можуть різко відрізнятися від оптичних властивостей ізольованих наночастинок. Періодичні або димерні структури плазмонних наночастинок призводять до нових поверхневих плазмонних резонансів і створення «гарячих точок» - сильного електричного поля між частинками. Сильно локалізоване та посилене поле, викликане поверхневими плазмонними резонансами, можна спостерігати в багатьох застосуваннях сенсорики [2]. Спектральний зсув піків пропускання або відбивання оптичних сенсорів значно збільшується, коли досліджувані структури знаходяться в посиленому електромагнітному полі [3]. З огляду на зростаючу важливість масивів плазмонних наночастинок та їх потенційне застосування, глибоке розуміння їхніх оптичних властивостей є ключовим.

Таким чином, у цій роботі ми зосередилися на дослідженні оптичних характеристик масиву наночастинок золота, зокрема впливу віддалі між поверхнями наночастинок і показника заломлення навколишнього середовища на їх оптичний відгук. Результати моделювання продемонстрували, що масив періодично розташованих наночастинок золота характеризується посиленням локальним електричним полем між наночастинками, яке обернено пропорційне відстані між частинками. Напруженістю поля та оптичними властивостями (відбиванням, пропусканням і поглинанням) можна зручно керувати, змінюючи відстань між частинками. У ході дослідження встановлено, що зміна відстані між поверхнею наночастинок на 1 нм призводить до значного зсуву спектральних кривих пропускання та відбивання на спектральній шкалі. Крім того, ці дослідження показали, що збільшення відстані між поверхнями наночастинок призводить до зменшення ближньої взаємодії між наночастинками золота в масиві. Тому отримані результати можуть бути успішно використані при виготовленні високочутливих плазмонних сенсорів з можливістю керування чутливістю та робочим спектральним діапазоном.

1. D. Dey, G. C. Schatz, "Plasmonic surface lattice resonances in nanoparticle arrays". MRS Bulletin, pp. 1-10, 2024.
2. V. Yesudasu, H. S. Pradhan, R. J. Pandya, "Recent progress in surface plasmon resonance-based sensors: A comprehensive review". Heliyon, Vol. 7, no 3, 2021, pp. e06321.
3. A. Philip, A. R. Kumar, "The performance enhancement of surface plasmon resonance optical sensors using nanomaterials: A review", Coordination Chemistry Reviews, Vol. 458, 2022, pp. 214424.

КРИСТАЛИ З ШЕЄЛІТНОЮ СТРУКТУРОЮ – ПЕРСПЕКТИВНІ АКУСТООПТИЧНІ МАТЕРІАЛИ

Н. Дем'янишин¹, А. Андрущак², Б. Мицик^{1*}

¹Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка НАН України, м. Львів, mytsyk@ipm.lviv.ua

²Національний університет «Львівська політехніка», м. Львів, Україна

Кристали з шеєлітною структурою ABO_4 (наприклад, $PbWO_4$, $CaWO_4$) відомі як перспективні матеріали в галузі лазерної фізики та оптоелектроніки [1]. Вони придатні також для акустооптичних застосувань, оскільки характеризуються відносно великими коефіцієнтами акустооптичної якості M_2 . Наприклад, кристали вольфрамату кальцію ($CaWO_4$) можуть використовуватися в акустооптичних пристроях модуляції світла, переважно, в ультрафіолетовому спектральному діапазоні, оскільки володіють відносно великими коефіцієнтами акустооптичної (АО) якості M_2 ($\sim 14 \cdot 10^{-15} \text{ c}^3/\text{кг}$) [2], а нижня межа області прозорості цих кристалів становить близько 130 нм. Отже, кристали з шеєлітною структурою мають реальні перспективи застосування в АО пристроях. Однак фотопружність більшості таких кристалів не досліджена. Це пов'язано зі складними матрицями п'єзооптичних та пружнооптичних коефіцієнтів (ПОК π_{im} та ПрОК p_{ik}) таких кристалів, що належать до тетрагонального класу симетрії $4/m$. Наприклад, матриця ПОК, крім головних коефіцієнтів π_{im} ($i, m = 1, 2, 3$), містить проблемні коефіцієнти π_{16} , π_{61} та π_{45} , однозначне і достовірне вивчення яких експериментальними методами пов'язано з низкою принципових труднощів. Детально про визначення вказаних ПОК шеєлітних кристалів $CaWO_4$ йдеться, наприклад, в роботі [3]. Відповідні ПрОК p_{ik} легко розрахувати на основі відомого тензорного виразу $p_{ik} = \pi_{im} C_{mk}$ (тут індекси i, k, m позначають відповідно напрямки поляризації світла, деформації та дії одновісного тиску, C_{mk} – коефіцієнти пружної жорсткості).

Зважаючи на труднощі експериментального встановлення матриць π_{im} та p_{ik} , в даній роботі для кількох шеєлітних кристалів визначено всі ПОК π_{im} та ПрОК p_{ik} методом квантово-механічного розрахунку [4], ефективність якого підтверджена в ряді робіт, див., наприклад, [5]). Для вибраних кристалів проведена також оцінка коефіцієнтів АО якості, які відповідають максимальним значенням пружнооптичного ефекту та малим швидкостям акустичних хвиль.

Основні результати

Методом квантово-механічного розрахунку на основі програми CRYSTAL17, розробленої Туринським університетом (Італія), для кристалів $PbWO_4$, $BaWO_4$, $BaMoO_4$ та $CaMoO_4$ визначено всі пружні та фотопружні (ПОК π_{im} і ПрОК p_{ik}) коефіцієнти. Кристали з шеєлітною структурою відносяться до класу симетрії $4/m$ і, відповідно, мають мають сім незалежних коефіцієнтів C_{mk} пружної жорсткості та S_{km} пружної податливості, а також десять незалежних пружнооптичних p_{ik} і п'єзооптичних π_{im} коефіцієнтів. Для їх розрахунку використано оптимізовані рівноважні параметри ґратки a і c та фракційні координати симетрично мінімізованого атома кисню x_0, y_0, z_0 .

На основі вказаних вище параметрів структури кристалів програма розраховує коефіцієнти пружної жорсткості C_{mk} , а коефіцієнти пружної податливості S_{km} знайдено методом розрахунку оберненої матриці: $S = C^{-1}$. Аналогічно пружнооптичні коефіцієнти p_{ik} розраховано на основі параметрів структури кристалів, а коефіцієнти π_{im} визначено з використанням відомого тензорного виразу $\pi_{im} = p_{ik} S_{km}$; тут S_{km} – розраховані коефіцієнти пружної податливості.

Як приклад, подаємо значення ПрОК p_{ik} для досліджених кристалів (табл. 1). Із цієї таблиці бачимо, що найбільші ПрОК p_{ik} , які формують акустооптичну ефективність матеріалу, характерні для кристалів CaMoO_4 ($p_{31} = 0.32$) та BaWO_4 ($p_{33} = 0.36$).

Table 1. Пружнооптичні коефіцієнти p_{ik}

p_{ik}	p_{11}	p_{12}	p_{13}	p_{31}	p_{33}	p_{44}	p_{45}	p_{16}	p_{61}	p_{66}
CaMoO_4	0.29	0.19	0.30	0.32	0.28	0.036	0.028	-0.074	-0.024	-0.056
BaMoO_4	0.22	0.27	0.28	0.29	0.28	0.043	-0.009	0.055	-0.001	0.051
BaWO_4	0.25	0.27	0.30	0.30	0.36	0.050	-0.004	0.045	0.004	0.045
PbWO_4	0.20	0.23	0.23	0.19	0.27	0.043	-0.006	0.010	0.020	0.049

Відповідно, кристал BaWO_4 має і великий коефіцієнт АО якості M_2 ($\sim 20 \cdot 10^{-15} \text{ c}^3/\text{кг}$). Таким самим за величиною коефіцієнтом M_2 володіє кристал PbWO_4 , незважаючи на мале значення максимального ПрОК ($p_{33} = 0.27$). Це зумовлено значно більшими показниками заломлення n_i кристалів PbWO_4 , адже $M_2 \sim (n_i)^6$ [6]. Отже, за величиною коефіцієнтів АО якості M_2 кристали BaWO_4 і PbWO_4 суттєво переважають інші досліджені в даній роботі кристали. Тому для вироблення реальних рекомендацій щодо прикладного застосування цих кристалів слід провести для них експериментальну верифікацію коефіцієнтів p_{ik} .

Підкреслимо, що для всіх досліджених кристалів з шеселітною структурою виявлено важливий у прикладному аспекті ефект: якщо світло поширюється вздовж оптичної осі, а вектор \mathbf{m} дії одновісного тиску є перпендикулярний до неї, то вектор \mathbf{i} поляризації світлової хвилі суттєво відхиляється від вектора \mathbf{m} (іноді на десятки градусів), рис. 1.

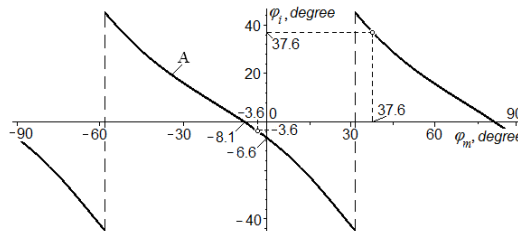


Рис. 2. Приклад залежності кута φ_i (відповідає вектору \mathbf{i}) від кута φ_m (відповідає вектору \mathbf{m} дії одновісного тиску для кристалу PbWO_4 . Світлими точками вказані значення $\varphi_i = \varphi_m$ (напрямки векторів \mathbf{i} та \mathbf{m} суміщені).

Аналогічний ефект (відхилення вектора \mathbf{i}) існує і для вектора деформації \mathbf{k} за дії на кристал, наприклад, акустичної хвилі. Тому аналіз відхилення напрямку \mathbf{i} від напрямку \mathbf{k} за поширення світла вздовж оптичної осі є важливим при розробці акустооптичних комірочок.

1. Sivers M., Clark M., Di Stefano P., Erb A. et al. Low-temperature scintillation properties of CaWO_4 crystals for rare-event searches. *J Appl Phys* 2015;118:164505(1-7).
2. Demyanyshyn N.M., Mytsyk B.G., Kost Ya.P., Solskii I.M., Sakharuk O.M. Elasto-optic effect anisotropy in calcium tungstate crystals. *Appl Opt* 2015;54:2347–2355.
3. Mytsyk B., Demyanyshyn N., Solskii I., Sakharuk O. Piezo- and elasto-optic coefficients for calcium tungstate crystals. *Appl Opt* 2016;55:9160–9165.
4. Dovesi R., Erba A., Orlando R., Zicovich-Wilson C.M., Civalleri B., Maschio L., Rèrat M., Casassa S., Baima J., Salustro S., Kirtman B. Quantum-mechanical condensed matter simulations with CRYSTAL. *WIREs Comput Mol Sci* 2018;e1360:1–36.
5. Mytsyk B, Erba A, Maul J, Demyanyshyn N, Shechepanskyi P, Syrotynsky O. Photoelasticity of CNGS crystals. *Appl Opt* 2023;62:7952–7959.
6. Uchida N, Niizeki N. Acoustooptic deflection materials and techniques. *Proc IEEE* 1973;61:1073–1092.

МОДЕЛЮВАННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЕЛІПСОЇДНИХ НАНОЧАСТИНОК ДЛЯ ЗАСТОСУВАННЯ В ПІДСИЛЕНІЙ ПОВЕРХНЕЮ РАМАНІВСЬКІЙ СПЕКТРОСКОПІЇ

**Олександр Ільїн, Юрій Смачило, Юрій Мисюк, Булавінець Тетяна,
Яремчук Ірина**

*Кафедра електронної інженерії, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С.Бандери, 12,
79013, Львів
e-mail: iryna.y.yaremchuk@lpnu.ua*

Поверхнево-підсилена Раманівська спектроскопія (SERS) на даний час є одним із високочутливих методів покращення комбінаційного розсіювання молекул, нанесених на наноструктуровані матеріали. Вона дозволяє отримати структурні сліди аналізованих речовин з низькою концентрацією, що досягається за рахунок збільшення електричних полів завдяки плазмонному чи хвилеводному резонансам. Крім того, технологія SERS проста в експлуатації та характеризується високою швидкістю аналізу. У даний час увага розробників в основному зосередилася на портативності SERS аналізаторів вибухових речовин та хімічних реагентів [1]. Проте, стратегія розробки SERS підкладок з наноструктурованою поверхнею має також важливе значення для приладів виявлення та ідентифікації речовин [2]. Таким чином, оптимізація архітектури та технології виготовлення підкладок SERS залишається актуальною задачею. Завданням, з яким потрібно зіткнутися для високопродуктивної SERS, є розробка стабільних, селективних і чутливих підкладок. Ідеальні SERS підкладки повинні мати високий рівень підсилення, хорошу повторюваність сигналу та стабільність підкладки при повторному використанні. Плазмонні наноструктури певної форми, розміру або розташування можуть бути легко синтезовані для формування високо-впорядкованих гарячих точок, полегшуючи виготовлення підкладок SERS з високою ефективністю виявлення.

У даній роботі проведено порівняння спектрів перерізу плазмонного поглинання сферичних наночастинок срібла, золота та міді. Встановлено, що зміна розміру наночастинок практично не впливає на зсув спектру для всіх досліджених випадків. При зміні радіуса частинки від 15 нм до 100 нм спостерігається червоний зсув піку спектру поглинання лише на декілька нм. Проте найбільшу інтенсивність піку поглинання мають наночастинок срібла. Зміна форми срібних наночастинок зі сферичної на еліпсоїдну по двох різних осях призводить до розщеплення спектру поглинання наночастинок на два окремих піки. Такі наночастинок можна використовувати як підкладки SERS для двох довжин хвиль збудження 532 і 785 нм. Розмір наночастинок слід вибирати у трьох пів-осях для отримання максимального поглинання на заданій довжині хвилі. Варто зазначити, що відхилення від розміру навіть ку декілька нм призводить до зсуву положення плазмонного піку. Більш глибоке розуміння механізмів SERS можна отримати, досліджуючи комбіновану залежність довжини хвилі збудження та морфології металу

1. J. Wu, L. Zhang, F. Huang, X. Ji, H. Dai, and W. Wu, "Surface-enhanced Raman scattering substrate for the detection of explosives: Construction strategy and dimensional effect", *Journal of hazardous materials*, vol. 387, pp. 121714, April 2020.
2. H. Sammi, R.V. Nair, N. Sardana, "Reusable SERS substrate based on interconnected metal network structure", *Materials Chemistry and Physics*, vol. 293, pp.126894, January 2023.

ВИЗНАЧЕННЯ ОПТИЧНИХ КОНСТАНТ І ТОВЩИН ШАРІВ ДВОШАРОВОЇ ІНТЕРФЕРЕНЦІЙНОЇ СТРУКТУРИ

О. П. Кушнір, С. В. Мягкота

*Львівський національний університет природокористування,
кафедра фізики та інженерної механіки,
вул. В.Великого, 1, Дубляни, Львівська обл.
oleg.p.kushnir@gmail.com*

На даний момент відомо багато різних методів визначення оптичних констант одношарових структур на основі аналізу інтерференційних спектрів відбивання або пропускання [1-2]. Також відомі методи визначення оптичних констант двошарових структур для окремих випадків, наприклад, коли показники заломлення шарів мають близькі між собою значення [3]. Необхідність розробки цих методів зумовлена потребою забезпечувати високу точність для товщин шарів і їх оптичних констант для виготовлення інтерференційних структур різного призначення.

Нами запропонований метод визначення оптичних констант і товщин шарів прозорої двошарової структури на поглинальній підкладці. Цей метод базується на використанні аналітичних умов виникнення оптичного биття в інтерференційних спектрах багатошарових структур [4]. Як відомо, умовою виникнення оптичного биття є просвітлення частини структури, розділеної найтовстішим шаром. Самі умови нульового відбивання було раніше встановлено, як для одно- [5], дво- [6], так і для багатошарових структур [7], а для випадку похилого падіння світла було також встановлено вирази для псевдобрюстерівських кутів, при яких досягається просвітлення структури [8].

В даній роботі використовувалася кутова залежність коефіцієнта відбивання для p -поляризації, з допомогою якої були визначені показники заломлення і товщини шарів двошарової структури. Така структура була виготовлена на основі прозорих матеріалів, і поглинальної кремнієвої підкладки. Перевагою розробленого методу є використання лише однієї кутової залежності коефіцієнта відбивання для визначення чотирьох параметрів (показників заломлення і товщин обох шарів). Крім того було встановлено прості співвідношення для визначення показників заломлення шарів. Для розрахунку цих величин потрібно мати лише коефіцієнт відбивання і відповідний кут падіння для точки дотику обвідних максимумів і мінімумів коефіцієнта відбивання. Також нами запропонована числова процедура для визначення товщин обох шарів.

Список літератури

1. M. Ghezzi, J. Opt.Soc.Amer. **58**(3), 368 (1968)
2. R. Swanepoel, J. Phys. E. **16**, 1214 (1983)
3. V. V. Filippov, Opt. Spektrosk. **101**, 485 (2006)
4. P. S. Kosobutsky, J. M. Bilyj, O. P. Kushnir, Ukrainian Journal of Physical Optics **12**, 89 (2011)
5. A. Smakula, Glastechn. Ber. **19**, 377 (1941)
6. K. Schuster, Annalen der Physik **4**, **352** (1949)
7. O. P. Kushnir, Ukrainian Journal of Physical Optics **10**, 82 (2009)
8. O. P. Kushnir, Journal Optics A: Pure Appl. Opt **11**, 085704 (2009)

ТЕНЗОРЕЗИСТИВНІ ЕФЕКТИ В НЕЙТРОННО-ЛЕГОВАНОМУ КРЕМНІЇ

Луцьков С.В., Панасюк Л.І.

*Луцький національний технічний університет, вул. Львівська 75, м. Луцьк, 43018,
luniovsr@ukr.net*

Використання монокристалічного кремнію в складних пристроях мікро- та наноелектроніки висуває, в першу чергу, вимогу його підвищеної однорідності за електрофізичними параметрами [1]. Промислові методи вирощування монокристалів кремнію в більшості випадків не дозволяють одержати дані монокристали з високооднорідним та радіальним розподілом домішок, що пов'язано з шаруватим розподіл легуючої домішки та іншими технічними труднощами [2, 3]. Вирішення даної проблеми вимагає пошуку нових технологічних процесів одержання кремнію підвищеної якості. В даному відношенні одержати монокристали n-Si з однорідним по об'єму розподілом домішки фосфору можливо з використанням методу нейтронного трансмутаційного легування. Проте, при нейтронному опроміненні в монокристалах кремнію утворюється багато простих та складних радіаційних дефектів, концентрація яких значно перевищує концентрацію трансмутаційного фосфору. А це вимагає проведення додаткового відпалу нейтронно-легованих монокристалів кремнію. При такому відпалі відбувається утворення нових дефектів з глибокими енергетичними рівнями – термодонорів, які виникають в Si з високим вмістом кисню [4, 5]. Дані глибокі рівні навіть при кімнатній температурі можуть впливати на різні фізичні властивості кремнію. Зокрема, при одновісній деформації може проявлятися зміна ступеня заповнення глибоких рівнів термодонорів і відповідно тензорезистивний ефект. Для кількісних же оцінок впливу одновісної деформації на енергетичні рівні термодонорів та відповідно тензоефекти в нейтронно-легованих монокристалах кремнію, підданих високотемпературному відпалу, необхідно мати також залежності енергії активації технологічних термодонорів від одновісного тиску. Одержані залежності можуть бути використанні при моделюванні та розробці на основі таких досить однорідних за електрофізичними властивостями монокристалів кремнію сенсорів високого одновісного тиску. Тому існує значний науковий та практичний інтерес вивчення впливу одновісної деформації на енергію активації глибоких рівнів термодонорів та пов'язаних з цим тензоефектів в нейтронно-легованих монокристалах кремнію. Це було метою дослідження даної роботи.

Для нейтронного легування використовувались досить чисті монокристали кремнію, які мали *p*-тип провідності та були вирощені за методом Чохральського в кристалографічному напрямку [100]. Концентрація легуючої домішки бору $N_A=1,4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$. Нейтронне трансмутаційне легування виконувалося в тепловій колоні ТК-1 реактора ВВР-М Інституту ядерних досліджень НАН України. Інтенсивність потоку теплових нейтронів складала $1,2 \cdot 10^{13} \text{ н} \cdot \text{см}^{-2} \text{ с}^{-1}$. Ізохорний відпал нейтронно-легованих монокристалів кремнію проводився в кремнієвому контейнері в інтервалі температур 800-850°C упродовж однієї години. Внаслідок опромінення відповідними потоками теплових нейтронів та додаткового високотемпературного відпалу монокристали кремнію набували провідності n-типу, з концентрацією домішки фосфору $N_D=2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$. Зразки кремнію для проведення досліджень тензоопору та тензо-холл-ефекту виготовлялися у формі прямокутних паралелепіпедів, розміри 0,5×0,8×8 мм та відстанню між парами холлівських контактів 2,5 мм.

Раніше нами для цих же нейтронно-легованих монокристалів n-Si на основі вимірювань температурних залежностей сталої Холла були визначенні енергії активації термодонорів $\Delta W_1=72,5\pm 1$ меВ та $\Delta W_2=257$ меВ. За даними робіт багатьох інших авторів термодонори в кремнії є, як правило, подвійними донорами, які можуть знаходитись в зарядових станах (0/+) та (+/+). Очевидно енергетичні рівні $E_C-(72,5\pm 1)$ меВ та E_C-257 меВ відповідають позитивному та подвійному позитивному стану термодонорів відповідно. Для одержання залежностей енергії активації термодонорів від одновісного тиску нами проводились вимірювання тензо-холл-ефекту при температурах $T=100$ К та $T=220$ К (рис. 1).

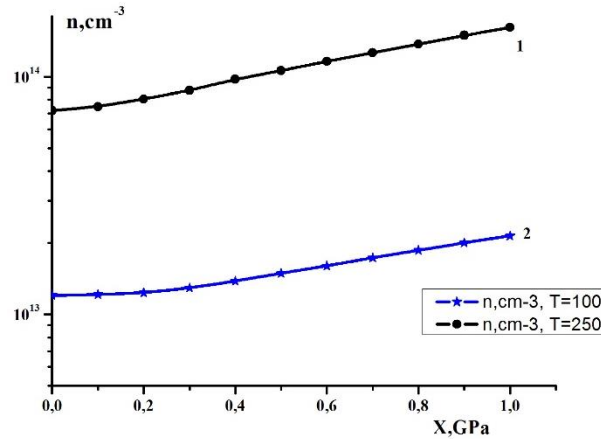


Рис. 1. Залежності концентрації електронів від одновісного тиску вздовж кристалографічного напрямку [100] для нейтронно-легованих монокристалів n-Si при різних температурах T , К: 1 – 250, 2 – 100.

Як видно з рис. 1, концентрація електронів для досліджуваних зразків n-Si зростає при одновісній деформації, що пов'язано зі зменшенням енергії активації термодонорів різного зарядового стану. Зокрема, зростання концентрації електронів за рахунок зменшення енергії активації глибокого рівня E_C-257 меВ при деформації є причиною зменшення питомого опору нейтронно-легованих монокристалів n-Si при одновісних тисках $P>0,7$ ГПа (рис. 2, крива 2).

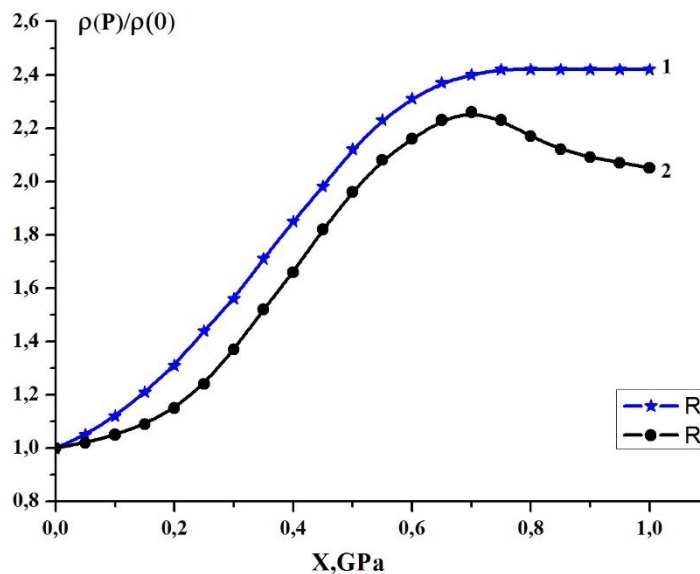


Рис. 2. Залежності тензоопору для одновісно деформованих вздовж кристалографічного напрямку [100] монокристалів n-Si при кімнатній температурі: 1 – кремній легований фосфором, 2 – нейтронно-легований кремній.

Для монокристалів кремнію, легованих домішкою фосфору, тензоопір при таких тисках виходить на насичення (рис. 2, крива 1). Це пов'язано з тим, що домішки фосфору при кімнатній температурі будуть повністю іонізованими і відповідно зміна енергії активації фосфору при деформації не буде впливати на зміну концентрація електронів в зоні провідності.

На основі розв'язків рівнянь електронейтральності одержано залежності енергії активації термодонорів від одновісного тиску (рис. 3).

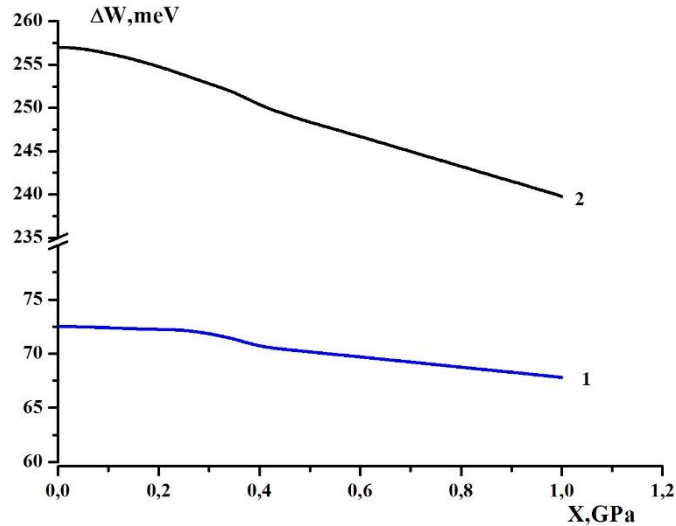


Рис. 3. Залежності енергії активації енергетичних рівнів термодонорів від одновісного тиску вздовж кристалографічного напрямку [100] для нейтронно-легованих монокристалів n-Si: 1 – $E_1 = E_C - (72,5 \pm 1)$ меВ, 2 – $E_2 = E_C - 257$ меВ

Під впливом одновісного тиску вздовж кристалографічного напрямку [100] глибокі рівні термодонорів будуть розщеплюватись на дві компоненти з різною енергією активації. Одна компонента буде зв'язана з двома мінімумами, а друга – з чотирма мінімумами зони провідності кремнію. Це є причиною деякої нелінійності залежностей ефективної енергії активації термодонорів (рис. 3) та концентрації електронів (рис. 1) від одновісного тиску при $P \leq 0,4$ ГПа (рис. 3, криві 1). Зменшення енергії активації рівня $E_2 = E_C - 257$ меВ є причиною зменшення тензоопору нейтронно-легованого n-Si при $P > 0,7$ ГПа (рис. 2).

Одержані ж монокристали кремнію методом нейтронного трансмутаційного легування та додаткового ізохорного відпалу в температурному інтервалі 800-850°C є набагато якіснішими за однорідністю тензоелектричних властивостей, ніж монокристали n-Si та n-Ge, модифіковані радіаційним опроміненням. Тому наявність при одновісних тисках $P > 0,7$ ГПа та кімнатній температурі для досліджуваних монокристалів нейтронно-легованого кремнію (рис. 2, крива 2) додаткових областей тензочутливості може знайти своє практичне використання в технологіях конструювання на основі таких монокристалів кремнію сенсорів високого одновісного тиску високої точності та з надійними робочими характеристиками.

Література

1. Tilli, M. Paulasto-Kröckel, M. Petzold, M. Theuss, H. Motooka, T. Lindroos. Handbook of silicon based MEMS materials and technologies. Elsevier, 2020. p. 1026.
2. P.I. Baranskii, A.E. Belyaev, G.P. Gaidar, Kinetic Effects in Multi-Valley Semiconductors, Naukova Dumka, Kyiv, 2019. p. 446.
3. A.E. Belyaev, P.I. Baranskii, G.P. Gaidar, Radiation-, thermally- and deformation-induced effects in silicon and germanium, Naukova Dumka, Kyiv, 2021, p. 318.
4. A.P. Dolgolenko. Modification of radiation defects in Si and Ge by background impurity. *Nuclear Physics and Atomic Energy*. 14, 377. 2013. p. 383.
5. S. Pizzini. Point Defects in Group IV Semiconductors: Common Structural and Physico-chemical Aspects. *Materials Research Forum LLC*. 2017. 10, p. 134.

ДЕФОРМОВАННИЙ РОЗПОДІЛ ДІРОК ПРИ УДАРНИЙ ІОНІЗАЦІЇ ДОМІШКИ В ОДНОВІСНО ДЕФОРМОВАНОМУ p-Ge<Ga>

Панасюк Л.І., Коваль Ю.В., Захарчук Д.А., Ящинський Л.В.
Луцький національний технічний університет,
leonid9030@gmail.com

У роботі [1] повідомлялося про зростання відносної концентрації носіїв струму в зоні легких дірок в одновісно-деформованих у випадку $X//[111]//E$ кристалах р-германію при ударній іонізації домішки галію. Пороговий по полю і тиску характер стрибка випромінювання з р-Ge, який спостерігався в [2] також при $X//[111]//E$ свідчить, мабуть, про виникнення стимульованого випромінювання, обумовленого інверсією заселеності у валентній зоні, розщепленій при одновісній деформації.

В даному повідомленні представлені експериментальні результати вивчення залежностей $E_{\text{пр}} / \dot{A}_{\text{пр}} = f(X)$ полів ударної іонізації домішки галію в р-Ge від одновісного тиску кристалів X , отриманих при $T=4,2\text{K}$ для різних напрямків осі деформації в широкому діапазоні легування $(4,0 \cdot 10^{12} - 3,4 \cdot 10^{15}) \text{см}^{-3}$.

Теорія валентних зон кристалів з різною симетрією, у тому числі для кристалів з кубічною симетрією, була розроблена Г.Л. Біром та Г.Е. Пікусом [3]. Результати дослідження показують, зокрема, що вплив одновісної деформації на валентні зони визначається, перш за все, зняттям виродження зон і зростанням (із збільшенням деформації) енергетичного розщеплення їх.

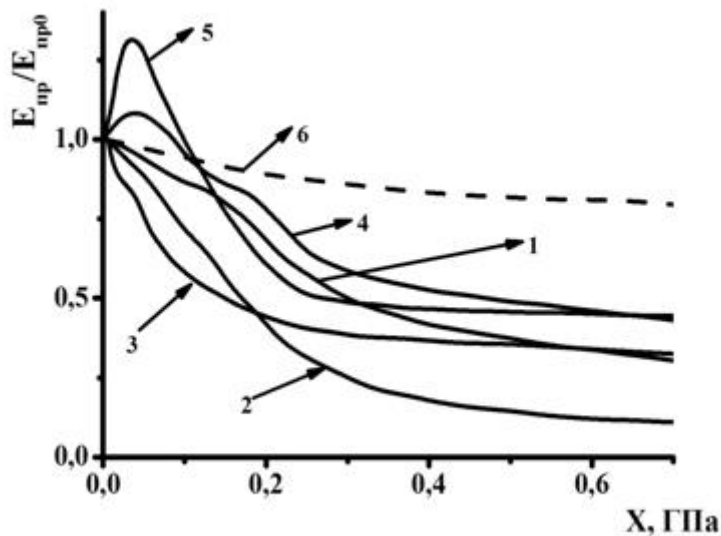


Рис. 1 Залежності полів ударної іонізації домішки галію в р-германії для різних орієнтацій одновісного тиску та концентрації домішки:

- криві 1,2,3 – $N_{\text{Ga}} = 4,0 \cdot 10^{12} \text{см}^{-3}$ для головних кристалографічних напрямків $X//[111]//E$, $X//[001]//E$ та $X//[110]//E$ відповідно.
- криві 4,5 для $N_{\text{Ga}} = 3,0 \cdot 10^{14} \text{см}^{-3}$ і $N_{\text{Ga}} = 3,4 \cdot 10^{15} \text{см}^{-3}$ у випадку $X//[111]//E$.

Так як використання сильних одновісних тисків напівпровідників [3,4] дає можливість змінювати в широких межах енергетичне розщеплення найнижчих по енергії валентних зон, то деформаційний перерозподіл носіїв струму між зонами з врахуванням перебудови енергетичного спектру дає можливість з'ясувати, на основі вивчення тензорезистивних ефектів, характерні особливості розподілу носіїв струму по енергії.

На Рис.1 представлені залежності полів ударної іонізації домішкових станів галію у германії р-типу в умовах одновісного тиску X для головних кристалографічних напрямків: $X//[111]//E$, $X//[001]//E$ та $X//[110]//E$ (криві 1-3 для найбільш чистих кристалів – $N_{Ga}=4,0 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, а також такі ж залежності для випадку $X//[111]//E$, записані для кристалів з різним рівнем легування. Криві 4,5 відповідно для N_{Ga} : $3,0 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ та $3,4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

Немонотонний характер залежностей свідчить про зростання полів ударної іонізації домішки в певній області енергетичних розщеплень зон легких і важких дірок, Такий вигляд залежностей $E_{i\delta} / \dot{A}_{i\delta i} = f(X)$ обумовлений зростанням відносної концентрації носіїв струму (що мають велике значення компоненти ефективної маси вздовж орієнтації осі деформації) в зоні легких дірок, яка зміщується при деформації кристала вгору по енергії.

У рівноважних умовах залежності $E_{i\delta} / \dot{A}_{i\delta i} = f(X)$ для $X//[111]//E$ являють собою монотонно падаючі криві (крива 6, рис.1).

Отримані дані свідчать про виникнення в умовах ударної іонізації домішки галію інверсії (по відношенню до рівноважної ситуації) заселеності валентної зони одновісно-деформованого р-Ge.

Таким чином, в умовах сильно витягнутого вздовж поля розподілу дірок при ударній іонізації домішки реалізується по відношенню до рівноважної ситуації інверсія заселеності у валентній зоні одновісно-деформованих р-Ge, що становить практичний інтерес з точки зору створення підсилювачів та генераторів випромінювання в далекій інфрачервоній області.

Список літератури

1. П.І.Баранський, В.Я.Дучал, В.Н.Єрмаков, В.В.Коломоєць / Плазма та нестійкості в напівпровідниках: тези VI Всесоюзного симпоз. м. Вільнюс. 1986. – С.232.
2. И.В. Алтухов, И.С. Каган, В.П. Синис, *Письма в ЖЭТФ* **47** №3, 136-138 (1988).
3. Бир Г.Л. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках/ Г.Л.Бир, Г.Е.Пикус.–М.: Наука, 1972. –584 с.
4. А.И.Елизаров, В.В.Коломоєць, В.В. Митин, *Физика и техника полупроводников* **9**, №7,1388-1390 (1975).

ВЛАСТИВОСТІ БІОСУМІСНИХ ПОКРИТТІВ, ОТРИМАНИХ ГАЗОВО-ДЕТОНАЦІЙНИМ ОСАДЖЕННЯМ ГІДРОКСИЛАПАТИТУ НА РІЗНІ ТИПИ ПІДКЛАДОК

**В.О. Юхимчук, І.П. Ворона, В.П. Темченко, В.Б. Лозінський, О.Є. Беляєв,
М.Я. Валах, Ю.М. Насека, О.Й. Гудименко**

*Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, 03028 м. Київ, проспект
Науки 41, Україна, E-mail: v.yukhymchuk@gmail.com*

Виробництво та застосування в хірургії медичних імплантатів постійно розширюється [1]. На сьогодні титан, завдяки своїм механічним властивостям та біотолерантності, є найбільш поширеним матеріалом для їх виготовлення. Проте, навіть титанові імплантати при їх вживленні в організм людини, інколи спричинюють запальні процеси [2]. Тому для уникнення таких негативних наслідків їх покривають біосумісними покриттями, частіше за все на основі трикальцій-фосфату (ТКФ) або гідроксилапатиту (ГАП). Покриття імплантатів біосумісними шарами здійснюється різними методами [3], кожен з яких має свої переваги та недоліки. На сьогодні, одним з перспективних методів осадження покриттів на імплантати є газОВО-детОНАЦІЙНЕ осадження (ГДО) [4]. Основою останнього є формування потоку газів, який виникає в результаті контрольованого вибуху пропану при його взаємодії з киснем, що рухається зі швидкістю, яка перевищує в декілька разів швидкість звуку. В цей потік автоматично подається порошок, що складається з мікрочастинок ГАП або ТКФ. Розігнані вибуховою хвилею мікрочастинок порошку вбудовуються в імплантат, формуючи за короткий час (~ 30 сек) однорідні покривні шари. Такі покриття характеризуються хорошою адгезією та однорідністю.

Що стосується титанових імплантатів, то, слід відзначити і деякі їх недоліки. Перш за все, вони досить важкі, що приводить до подовження часу їх адаптації в живому організмі та можливості руйнування кісткової тканини в процесі експлуатації. Тому йде пошук нових матеріалів для виготовлення імплантатів. Найбільш перспективними в цьому сенсі виглядають полімерні матеріали, які поєднують хороші механічні властивості зі своєю легкістю та гнучкістю. Одним з них є полієфірефіркетон (ПЕЕК). Однак і для імплантатів на основі ПЕЕК залишається актуальною проблема їх покриття шарами фосфатів кальцію. Важливим етапом в процесі формування захисних покриттів є легування їх сріблом. Причому необхідно знайти оптимальну концентрацію останнього, оскільки мала доля срібла не буде мати ефективні антибактеріальні властивості, а занадто велика (більше 2%) вже є небезпечною для людського організму. Важливим чинником при формуванні біопокриттів є їх собівартість. Оскільки чистий порошок ГАП є досить високовартісним, тому на сьогодні є намагання технологів сформуванню його в процесі ГДО з окремих компонентів. На вирішення всіх вищезазначених проблем були спрямовані наші зусилля в процесі виконання цієї роботи.

Тому метою даної роботи було дослідження структури, морфології та фазового складу біосумісних покриттів на ПЕЕК, отриманих методом ГДО з порошку ГАП, та його порівняння з ГАП покриттями на різних типах підкладок, сформованими в подібних

умовах; отримання біопокриттів, легованих сріблом та отримання ГАП покриттів в процесі ГДО з окремих прекурсорів.

Для формування біосумісних покриттів використовувався порошок ГАП з середніми розмірами мікрочастинок ~ 50 мкм. Порошок подався у вибуховий потік газів в процесі ГДО і при однакових технологічних параметрах (співвідношення пропану та кисню, відстані до мішені, часу осадження) формувалися покриття на різних типах підкладок. Отримані ГАП покриття досліджувалися методами раманівської спектроскопії, X-променевої дифрактометрії, скануючої електронної мікроскопії (SEM) та енерго-дисперсійного аналізу (EDS).

Попередні дослідження покриттів, що були сформовані методом ГДО на ПЕЕК та титані, показали, що на полімері, на відміну від Ті, крім ГАП наявний ТКФ. Причому ТКФ формується на інтерфейсі між ПЕЕК підкладкою та ГАП покриттям. Зрозуміло, що такі відмінності зумовлені властивостями підкладок. В процесі отримання покриття методом ГДО частинки ГАП прискорюються до швидкості ~ 5 Мах, а потім при зіткненні з підкладкою різко зупиняються. При цьому за рахунок втрати кінетичної енергії вони сильно розігріваються і в них виникають дефекти та механічні напруження. Добре відомо [5], що при нагріванні ГАП трансформується через фазу оксиапатита в ТКФ. Проте, в літературі температура трансформації ГАП \rightarrow ТКФ досить суттєво різниться (від 700 [6] до 1300 $^{\circ}\text{C}$ [7]). Ймовірно, це пов'язано з якістю вихідного ГАП, а саме його кристалічністю, розміром гранул, наявністю домішок, їх кількістю тощо. Тому перед аналізом покриттів було проведено дослідження термічної стабільності ГАП, який використовувався в даній роботі. Відпал вихідного порошку ГАП при 1200 $^{\circ}\text{C}$ протягом 2 годин показав, що він за даних умов не трансформувався в ТКФ, більш того в нього зростала кристалічна досконалість, про що свідчать раманівські спектри та X-променеві дифрактограми.

З технологічної точки зору титан та ПЕЕК, як матеріали для імплантатів, суттєво відрізняються за двома параметрами, а саме коефіцієнтами теплової провідності та твердістю. Тому для кращого розуміння процесів, які відбуваються в процесі формування покриттів методом ГДО, були отримані покриття на різних підкладках, що відрізняються за вказаними параметрами, зокрема, це технічний та медичний титан, мідь, кварц, скло та фторопласт. Дослідження методами раманівської спектроскопії та X-променевої дифрактометрії отриманих покриттів на різних типах підкладок показали, що на підкладках, яким притаманна висока твердість та високий коефіцієнт теплопровідності крім кристалічного ГАП формується аморфна фаза ГАП, а на підкладках з низьким коефіцієнтом теплопровідності формується проміжний шар з ТКФ.

Таким чином, проведені дослідження допомагають краще зрозуміти процеси формування ГАП покриттів при їх утворенні методом ГДО. Розігнані вибуховою хвилею мікрочастинки ГАП при зіткненні з поверхнею підкладки за рахунок різкої втрати кінетичної енергії розігріваються та деформуються. В результаті вони частково втрачають свою кристалічність, формуючи при цьому додаткові фази аморфного та сильнодефектного ГАП. Частка додаткових фаз залежить від твердості матеріалу підкладки – чим більша твердість, тим більший внесок додаткових фаз. Подальший стан утвореного покриття залежить від теплопровідності матеріалу підкладки. Для матеріалів

з високою теплопровідністю, таких як мідь, титан та кварц, відбувається швидке охолодження покриття за рахунок розсіювання тепла підкладкою. При цьому утворена фази аморфного ГАП та сильнодефектного ГАП в покритті зберігаються. Якщо в якості підкладки використовуються полімерні матеріали, такі як ПЕЕК та фторопласт, котрі характеризуються низькою теплопровідністю, то розсіювання тепла відбувається повільніше. Це призводить до того, що частинки ГАП перебувають під дією високих температур протягом тривалішого часу, достатнього для того щоб аморфний ГАП або більша його частина перетворилась в ТКФ.

Щоб отримати антибактеріальне ГАП покриття у вихідний порошок ГАП автори цієї роботи додавали різну кількість порошку AgNO_3 . Концентрацію останнього варіювали в таких межах, щоб доля срібла змінювалася від 0.2 до 2 відсотків. Безпосередньо зареєструвати срібло в раманівських спектрах неможливо, а в X-променевих дифрактограмах воно впливає тільки на сталу ґратки. Проте дослідження методом EDS підтвердили наявність срібла в сформованих ГАП покриттях. Наступним цікавим етапом цієї роботи був синтез ГАП безпосередньо в процесі взаємодії прекурсорів під час ГДО. Для самого процесу використовувалися порошки $\text{Ca}(\text{OH})_2$ та $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$, які в результаті реакції: $10\text{Ca}(\text{OH})_2 + 6(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4 = \text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2 + \text{H}_2\text{O} + \text{NH}_3$ формують ГАП. Дійсно, як показали раманівські дослідження сформовані таким чином покриття як ПЕЕК, так і титані відповідають ГАП з певною долею аморфної фази. Відпал таких покриттів на титані при температурі 640 °C приводить до трансформації аморфної частини ГАП в кристалічну.

Робота виконана в рамках проекту Національного фонду досліджень України № 200/0103 «Розробка технології біосумісних антибактеріальних покриттів для ортопедичних імплантатів методом газодетонаційного осадження для потреб військової та цивільної медицини».

Список літератури

1. M. Furko, C. Balázi. Calcium phosphate based bioactive ceramic layers on implant materials preparation, properties, and biological performance. *Coatings*. 2020. 10, No 9. P. 823. <https://doi.org/10.3390/coatings10090823>.
2. Y. Sasikumar, K. Indira, N. Rajendran. Surface modification methods for titanium and its alloys and their corrosion behavior in biological environment: A review. *J. Bio- Tribo-Corros*. 2019. 5. P. 36. <https://doi.org/10.1007/s40735-019-0229-5>.
3. R. Gadow, A. Killinger, N. Stiegler. Hydroxyapatite coatings for biomedical applications deposited by different thermal spray techniques. *Surf. Coat. Technol.* 2010. 205. P. 1157–1164.
4. V.P. Temchenko, V.B. Lozinskii, I.P. Vorona, O.Yo. Gudymenko, Iu.M. Nasieka, V.M. Dzhagan, O.F. Isaieva, V.O. Yukhymchuk, M.Ya. Valakh, A.E. Belyaev. Structural and morphological properties of hydroxyapatite coatings obtained by gas-detonation deposition on polymer and titanium substrates. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 2023. V. 26, No 4. P. 368-375.
5. T. Yokoi, T. Goto, T. Kato, S. Takahashi, J. Nakamura, T. Sekino, C. Ohtsuki, and M. Kawashita. Hydroxyapatite Formation from Octacalcium Phosphate and Its Related Compounds: A Discussion of the Transformation Mechanism. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 2020, 93, 701–707 | [doi:10.1246/bcsj.20200031](https://doi.org/10.1246/bcsj.20200031).
6. N. Bohme, K. Hauke, M. Dohrn, M. Neuroth, and T. Geisler. High-temperature phase transformations of hydroxyapatite and the formation of silicocarnotite in the hydroxyapatite–quartz–lime system studied in situ and in operando by Raman spectroscopy. *J. Mater Sci* (2022) 57:15239–15266. <https://doi.org/10.1007/s10853-022-07570-5>.
7. S.-F. Ou, S.-Yu. Chiou, K.-L. Ou. Phase transformation on hydroxyapatite decomposition. *Ceramics International*. 39, Issue 4, (2013) s 3809-3816.

Relaxation processes in layered $\text{Cu}_{0.15}\text{Fe}_{1.7}\text{PS}_3$ polycrystals

Henrietta Ban, David Gal, Andriy Haysak, Alexander Molnar

*Department of the Physics of Semiconductors, Uzhhorod National University,
Voloshina Str. 54, Uzhhorod, 88000, Ukraine*

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

Layered crystals of the $\text{MeI Me}_2\text{P}_2\text{S}_6$ family are promising 2D functional materials for nanoelectronics. One of the most interesting of them is CuInP_2S_6 and solid solutions based on it. However, the family of these materials contains many crystals that can be used as catalysts, solid electrolytes, hydrogen storage devices, or active media for various types of sensors. Among them, $\text{Cu}_{0.15}\text{Fe}_{1.7}\text{PS}_3$ can be noted, which, according to our data, can be used as a humidity sensor.

We investigated the temperature dependence of the dielectric constant of $\text{Cu}_{0.15}\text{Fe}_{1.7}\text{PS}_3$ polycrystals in the temperature interval $80\div 450$ K and the frequency range $10\div 10^5$ Hz. The anomalies observed at low temperatures ($100\div 200$ K), can be explained in the Maxwell-Wagner relaxation model, which is described by the formula

$$\varepsilon^* = \varepsilon_\infty + \frac{\Delta\varepsilon}{1+i\omega\tau} - i\frac{\sigma'}{\omega}, \quad (1)$$

where ε_∞ is the high frequency permittivity, $\sigma' = \omega\varepsilon_0\varepsilon''$ electric conductivity calculated from the imaginary part of complex dielectric permittivity. Such behavior is often found in heterogeneous systems in which components of the dielectric material have different conductivity [1].

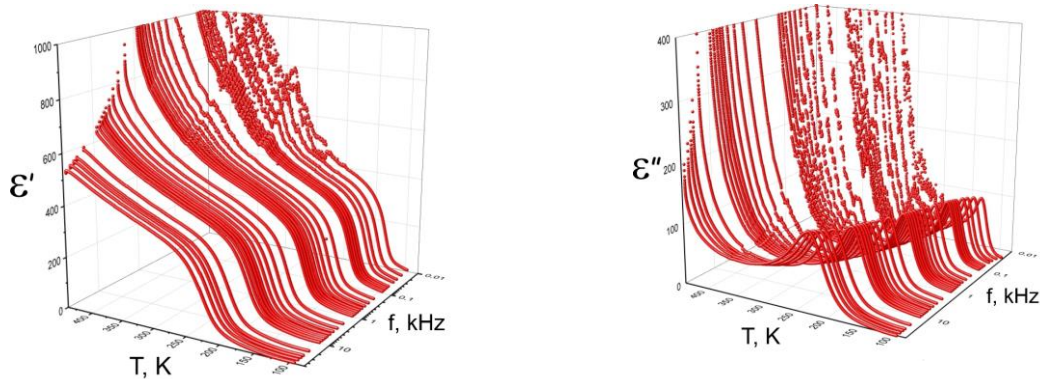


Fig. 1. Temperature dependence of real and imaginary part of dielectric permittivity of $\text{Cu}_{0.15}\text{Fe}_{1.7}\text{PS}_3$

In addition to these features, we found two more anomalies in both the permittivity and dielectric losses at temperatures of 273K and 373K at low frequencies, which is most likely associated with the presence of water molecules in the interlayer space, as evidenced by the disappearance of this anomalies after short-term annealing of the samples at a temperature of 400K. The magnitude of the "depth" of anomalies, as it turned out, depends on the humidity of the environment. The disadvantage of this phenomenon (and maybe an advantage) can be considered its cumulative nature.

The change in dielectric permittivity and loss anomalies at temperatures of 273K and 373K at low frequencies depends on the ambient humidity, which can be used to create nanoscale humidity sensors based on $\text{Cu}_{0.15}\text{Fe}_{1.7}\text{PS}_3$.

1. *Dziaugys A., Macutkevicius J., Svirskas S., Juskenas R., Wencka M., Banys J., Motria S.F., Vysochanskii Yu. Maxwell-Wagner relaxation and anomalies of physical properties in $\text{Cu}_{0.15}\text{Fe}_{1.7}\text{PS}_3$ mixed material // Journal of Alloys and Compounds – 2015. – 650, P. 386-392.*

Phase transitions in TIInS₂ layered crystals at high hydrostatic pressure

P.P. Guranich¹, R.R. Rosul¹, P.Huranych¹, O.O. Gomonnai¹,
A.V. Gomonnai², A.G. Slivka¹

1- Uzhhorod National University, Ukraine

2- Institute of Electron Physics, Ukraine

pavlo.guranich@uzhnu.edu.ua

Considerable interest in TIInS₂-type crystals is related to the fact these crystals are ferroelectric semiconductors with a "quasi-two-dimensional" structure where a series of phase transformations occurs: paraelectric, incommensurate, ferroelectric phases.

The studies of dielectric and optical properties of TIInS₂ single crystal were carried out in the temperature interval 150–240 K and in the hydrostatic pressure range up to 700 MPa. Temperature dependences of the dielectric permittivity of TIInS₂ crystal at various hydrostatic pressure values are shown in Fig.2. With pressure increase to 550 MPa, the anomalies of the dielectric permittivity shift linearly towards higher temperatures. Simultaneously, a decrease of the maximal values of the dielectric permittivity is observed as well as an increase of the temperature interval of the incommensurate phase.

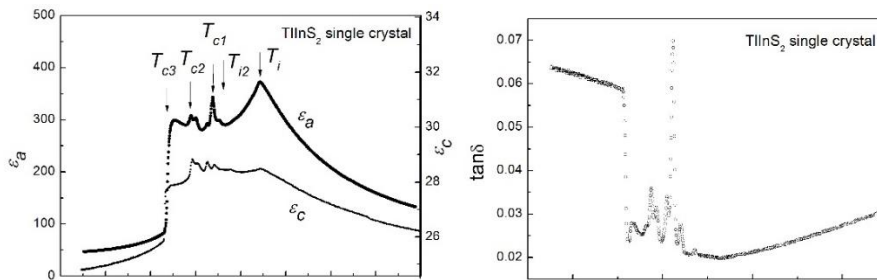


Fig.1. Temperature dependences of the dielectric permittivity ϵ and dielectric loss tangent $\tan\delta$ for TIInS₂ crystal.

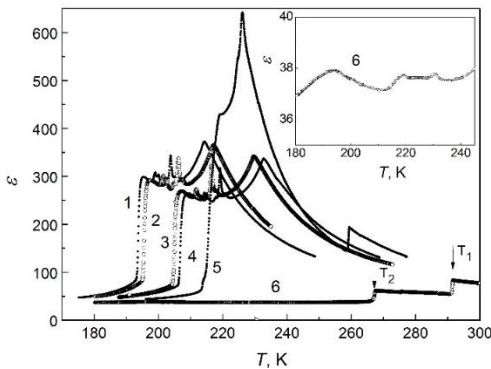


Fig. 2. Temperature dependences of the dielectric permittivity ϵ for TIInS₂ single crystal at different hydrostatic pressures 0 MPa (1), 100 MPa (2), 365 MPa (3), 410 MPa (4), 610 MPa (5), 630 MPa (6). The inset shows a part of curve 6 zoomed in to a larger scale (heating mode).

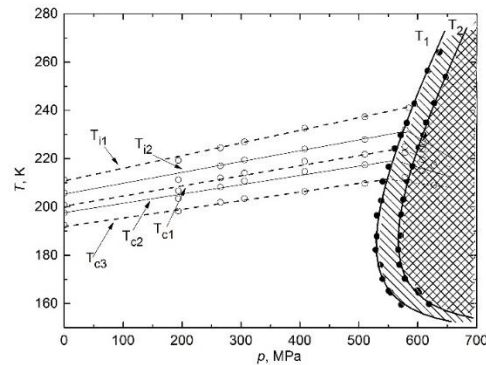


Fig. 3. (p, T) phase diagram of the TIInS₂ crystal.

The pressure behaviour of the Ti1, Ti2, Tc1, Tc2, and Tc3 temperatures is shown in the (p, T) diagram of the TIInS₂ crystal under study (Fig. 1). In this diagram the area above the Ti(p) transition

line corresponds to the paraelectric phase. The range of existence of the incommensurate structure is restricted by the $T_i(p)$ and $T_c(p)$ lines. The range below $T_c(x)$ transition line corresponds to the ferroelectric state. Lines T_1 and T_2 in the (p, T) diagram correspond to the transitions at to the high-pressure phases.

Domain structure in crystals $TlInS_2$ in the region of high pressure phases at $p > 550$ MPa are investigated. Ferroelastic domain structure in the high-pressure phases observed in the plane of the layers of the crystal and is manifested in the form of stripe-type structures. The features of this domain structure were studied.

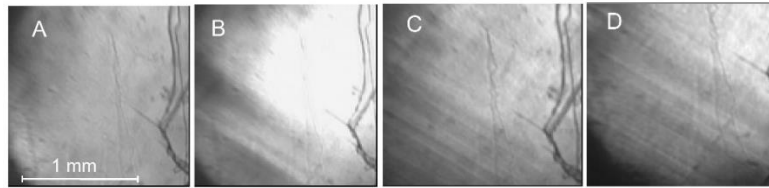


Fig. 4. Image of the $TlInS_2$ single crystal in crossed polarisers at the temperature of 190 K and different hydrostatic pressure values: 500 MPa (A), 550 MPa (B), 590 MPa (C), 620 MPa (D).

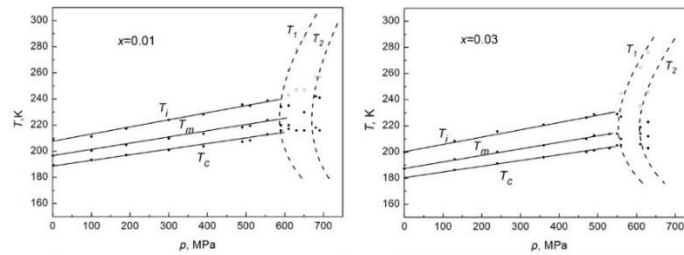


Fig. 5. (p, T) phase diagram of the $TlIn(S_{1-x}Se_x)_2$ polycrystals.

The presence of the structure of ferroelastic domains at high pressures enables us to claim that the high-pressure phase in the $TlInS_2$ crystal is a ferroelastic one. The transition to this phase with increasing pressure is achieved via a sequence of two first-order phase transitions with an intermediate phase. A number of features are revealed in the polycritical region in the range of pressures 550–650 MPa and temperatures 180–220 K. Thus, the (p, T) phase diagram of the $TlInS_2$ crystal in the pressure range $p > 550$ MPa is determined.

Similarly to the case of $TlInS_2$ single crystal [8], the changes in the $\epsilon(T)$ dependences result from polycritical phenomena in the (p, T) phase diagram of the $TlIn(S_{1-x}Se_x)_2$ polycrystals (Fig. 5). The region above the $T_i(p)$ transition line corresponds to the paraelectric phase while the region of existence of the incommensurate structure is restricted by $T_i(x)$ and $T_c(x)$ lines. The area below the $T_c(x)$ transition line corresponds to the ferroelectric phase. Dashed lines in the (p, T) diagrams corresponds to the transitions to high-pressure phases at T_1 and T_2 . The $T_1(p)$ and $T_2(p)$ lines are first-order PT lines with a considerable (temperature and pressure) hysteresis.

Based on the investigation of the temperature and pressure dependences of dielectric properties of $TlIn(S_{1-x}Se_x)_2$ polycrystals, their (p, T) phase diagrams were built. The polycritical region in the (p, T) diagrams of the crystals under investigation is observed at pressures 550–600 MPa.

EXPERIMENTAL AND THEORETICAL STUDY OF THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF Na₂SO₄ CRYSTAL

M.Ya. Rudysh¹, M. Piasecki¹, A.O. Fedorchuk³, P.A. Shchepanskyi², A.I. Kashuba⁴

¹Faculty of Science and Technology, J. Długosz University, 13/15 Armii Krajowej al., PL-42-201, Częstochowa, Poland

²Faculty of Physics, Ivan Franko National University of Lviv, 8 Kyryla and Mefodiy str., UA79005, Lviv, Ukraine

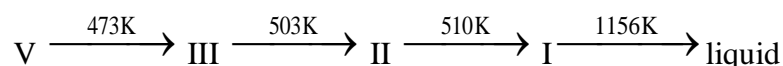
³Department of Inorganic and Organic Chemistry, Lviv National University of Veterinary Medicine and Biotechnologies, 50 Pekarska Str., UA-79010 Lviv, Ukraine

⁴Department of General Physics, Lviv Polytechnic National University, 12 Bandera Str., 79013 Lviv, Ukraine

The search for new materials promising for practical use in industry and improving the properties of already known materials requires solving a number of problems. In particular, they include the search for high-purity starting components, the development of material synthesis methods, its processing, etc. Often, in practice, it is not possible to obtain high-quality material, or it turns out to be unstable. Therefore, finding ways to synthesize high-quality materials is a relevant task.

Recently, dielectric crystals of the A₂BX₄ group (where A = Li, Na, K, Rb, Cs, NH₄; B = S, Se, Be, Zn; X = O, F, Cl) have attracted increasing attention of researchers due to their optical, nonlinear optical and luminescent characteristics [1]. Sodium sulfate (Na₂SO₄) is one of such crystals. This compound is of interest due to the prospects of its use in supercapacitors [2] for efficient energy accumulation and storage. The properties of materials enhanced with nanoparticles are also being actively studied [3]. At the same time, research is conducted to study the luminescent properties of pure and impurity Na₂SO₄ crystals as well as their composites of various compositions [4].

According to literature data, the following sequence of phase transitions is present in the compound:



The symmetries of these phases are as follows: V – *Fddd* (D_{2h}^{24} , $Z = 8$); III – *Cmcm* (D_{2h}^{17} , $Z = 4$); II – *Pbnm* (or *Pnam*, D_{2h}^{16} , $Z = 4$); and I – *P6₃/mmc*.

In this work, Na₂SO₄ crystals were synthesized from an aqueous solution. It was found that when growing crystals from an aqueous solution by the method of solvent evaporation under normal conditions, transparent colorless crystals are obtained. However, after their removal from the solution in which they grew, the crystals are unstable and cannot be stored for long.

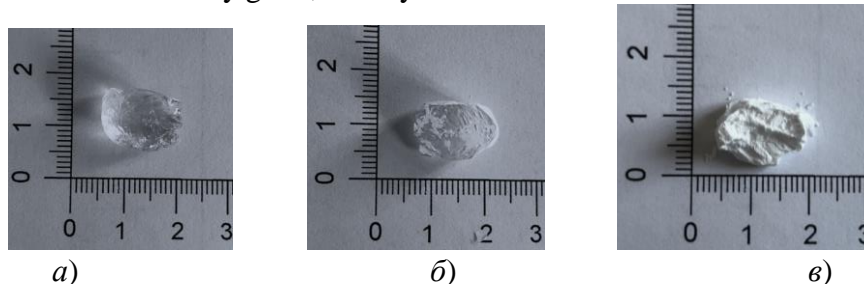


Fig. 1. Photo of Na₂SO₄ crystals grown under normal conditions a) freshly obtained b) after 45 min. c) after 24 hours.

A rapid destruction of what appears to be a high-quality crystal is observed, which consists in its transformation into a fine white powder. The kinetics of destruction of the grown sample is shown in Fig. 1. Growing the crystal under modified conditions at higher temperature made it possible to obtain stable crystals of good optical quality. The resulting crystal is stable in the atmosphere and can be stored for a long time.

For the grown crystal, structural studies were carried out using the XRPD method and crystallographic data were obtained.

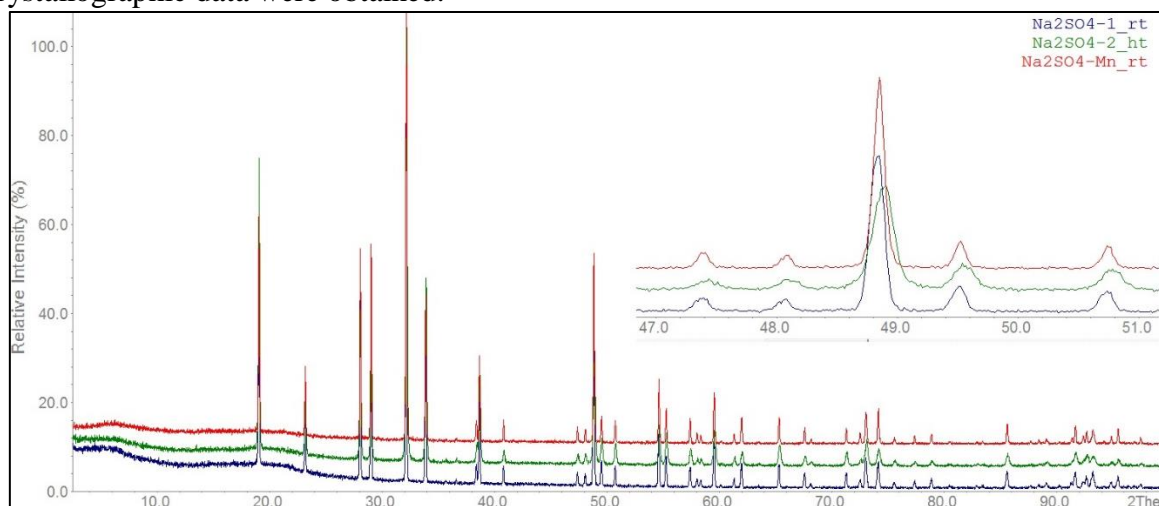


Fig. 2. Diffractograms recorded for Na_2SO_4 crystals obtained under different growth conditions.

In order to clarify the features of the structure of the electronic levels of the crystal, first-principle calculations were carried out. The work uses the method based on density functional theory (DFT), which is based on the Kohn-Sham formalism. The resulting band structure of the crystal $E(k)$ is characterized by features inherent in other crystals of the A_2BX_4 group studied earlier. In particular, the presence of narrow bands in the valence band is characteristic of materials containing isolated structural complexes. From the calculated total and partial density of states, an analysis of the origin of the electronic levels of the crystal was carried out.

In order to find out the value of the band gap of the Na_2SO_4 crystal, an experimental study of the transmission spectra of the crystal sample obtained in this work was conducted. The transmission spectra of the Na_2SO_4 crystal were measured using a SF-46 spectrophotometer. A DDS-30 deuterium lamp operating in the wavelength range from 190 to 350 nm was used as a light source. A Na_2SO_4 crystal sample with a thickness of 0.7 mm was used to measure transmittance. The sample was obtained by chipping the crystal in the plane of the XY layers.

Results present in this work has been obtained with the support of the Project of Young Scientists 0123U100599 of the Ministry of Education and Science of Ukraine. This work was partially supported by the National Science Centre (NCN), Poland, grant number: NCN 2018/31/B/ST4/00924.

References

1. M.Ya. Rudysh, P.A. Shehepanskyi, V.Y. Stadnyk, R.S. Brezvin, Band structure and refractive parameters of crystals with isotropic point, Lviv (2022), p.264.
2. S. Zhu, Y. Sun, K. Li, Y. Dang, X. Guan, Journal of Power Sources, 597, 234150 (2024).
3. W. Huang, G. Zhou Journal of Molecular Liquids, 397, 124157 (2024).
4. F. Omer, Y. Abdulla, A. Noh, Brazilian Journal of Radiation Sciences, 12, 1, e2322, (2024).

ЕЛЕКТРОПРОВІДНІ ВЛАСТИВОСТІ Si

У ДІАПАЗОНІ ЧАСТОТ 10^{-2} – 10^6 Гц

О.В. Балабан, Д.М. Винник, Б.Я. Венгрин, А.Б. Данилов, А.С. Андрущак

Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна

E-mail: oksana.v.balaban@lpnu.ua

Дослідження електрофізичних характеристик матеріалів дедалі більше стає необхідним для визначення можливостей подальшого їх застосування, зокрема, для виявлення нових закономірностей, визначення зернистої будови матеріалу, зміни властивостей у зовнішніх фізичних полях. Одним з основних електрофізичних параметрів матеріалів є їх питомий опір ρ або ж величина обернена до нього-питома електропровідність σ . З розвитком технологій вимоги до точності визначення питомого опору все більше зростають як і потреби у вимірюванні опору матеріалів різної геометричної форми, хімічної будови чи властивостей. Тому сьогодні є значна різноманітність методів його вимірювання. Широко використовуваними є дво- [1] та чотири- [2] зондові, а також метод Ван-дер-Пау [3], якими можна вимірювати однорідні та неоднорідні зразки, а також досліджувати просторовий розподіл питомого опору. Силкові лінії напруженості електричного поля для зондових методів непаралельні і розподілені неоднорідно по перерізу зразка. Тому спочатку потрібно теоретично розрахувати розподіл електричного потенціалу в досліджуваному зразку, а тоді знаходити взаємозв'язок між питомим опором і вимірюваними величинами – струмом та напругою.

Ще одним методом дослідження провідності, але вже в широкому частотному діапазоні, є імпедансна спектроскопія. Вона дозволяє здійснювати вимірювання в діапазоні частот 10^{-2} – 10^6 Гц. В цій в роботі досліджувалися зразки Si, а їх вимірювання здійснювалися за кімнатної температури на спектрометрі Autolab (Metrohm Autolab B.V., Нідерланди). Амплітуда сигналу, який подавався на зразок, становила 5мВ. На зразки Si (табл. 1) напилювалися металічні контакти з торцевого боку. Оскільки Si фотоактивний, то на першому етапі вимірювання проводилися для визначення темного опору.

Таблиця 1. – Параметри досліджуваних матеріалів

Зразок	Матеріал	Товщина d , см	Довжина h (відстань між контактами), см	Ширина l , см
Si-1	n-Si	$330 \cdot 10^{-4}$	2	2
Si-2	n-Si	$450 \cdot 10^{-4}$	2	2
Si-3	p-Si	$510 \cdot 10^{-4}$	2	2

Електропровідні властивості Si представлено (рис. 1, рис. 2) у вигляді частотних залежностей дійсної частини імпедансу $\text{Re} Z(f)$ досліджуваних зразків та питомого об'ємного опору $\rho_v(f)$ (рис. 2) матеріалів Si. Обчислення $\rho_v(f)$ здійснювалося за формулою:

$$\rho_v(f) = \frac{\text{Re}Z(f) \cdot l \cdot d}{h},$$

де l – ширина, d – товщина зразка, h – відстань між контактами.

Зазначимо, що форма кривих $\text{Re}Z(f)$ та $\rho_v(f)$ (рис. 1, рис. 2) вказує на те, що на низьких частотах спостерігається незалежність опору Si від частоти, що свідчить про наявність делокалізованих носіїв заряду у Si. Як і очікувалося з ростом частоти

відбувається спад $\text{Re } Z(f)$, що ймовірно вказує на внесок перескокової провідності по локалізованих станах [4] поблизу рівня Фермі у загальну провідність матеріалів.

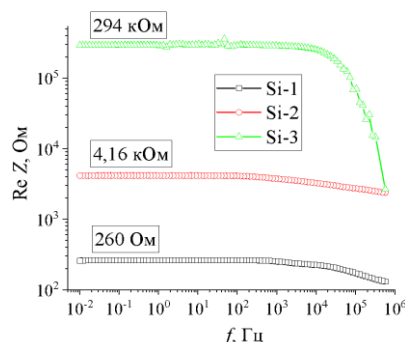


Рисунок 1. – Частотна залежність дійсної частини імпедансу $\text{Re } Z$ зразків. Чисельні значення на графіках відповідають опорам за постійного струму (у низькочастотній границі)

Отримані значення питомого опору на низьких частотах (постійний струм) будуть використані в подальших дослідженнях під час аналізу фотогенерації носіїв заряду в цих матеріалах під час освітлення зразків. Тут також не менш важливим параметром є час релаксації фотопровідності.

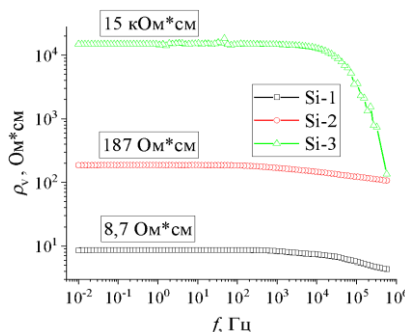


Рисунок 2. – Частотна залежність питомого опору ρ_v матеріалів Si. Чисельні значення на графіках відповідають опорам за постійного струму (у низькочастотній границі)

Отже, імпедансні вимірювання у широкому частотному діапазоні $10^{-2} - 10^6$ Гц матеріалів Si вказали на внесок двох різних механізмів у результуючу електропровідність. Так, для Si перескоки носіїв заряду по локалізованих станах поблизу рівня Фермі призводять до росту електропровідності матеріалів на частотах $>10^4$ Гц. Отримані значення питомого опору на низьких частотах (постійний струм) будуть використані в подальших дослідженнях під час аналізу фотогенерації носіїв заряду в цих матеріалах.

Подяка. Робота виконана за підтримки Національного фонду досліджень України (проект №2021.01/0410).

Список літератури

1. Аніщенко В.О., Венгер Є.Ф., Корсунська Н.О., Мельничук Л.Ю., Хоменкова Л.Ю. Електричні методи дослідження матеріалів. Лабораторний практикум: навчальний посібник / за ред. Л.Ю. Мельничук. Ніжин: НДУ ім. М. Гоголя, 2018. 153 с
2. Коперльос Б.М., Студеняк І.П., Сусліков Л.М. Напівпровідникова і фізична електроніка. Лабораторний практикум: навчальний посібник. Ужгород: УжНУ «Говерла», 2019. 136 с.
3. Van der Pauw L.J. A method of measuring specific resistivity and Hall effect of discs of arbitrary shape. *Philips Res. Repts.* 1958. Vol. 13. P. 1–9.
4. Pollak M., Geballe T.H. Low-frequency conductivity due to hopping processes in Silicon. *Phys. Rev.* 1961. Vol.122, №6. P. 1742–1753.

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СУЛЬФІДУ $\text{Nd}_3\text{Ag}_{0.45}\text{Ga}_{1.52}\text{S}_7$

Блашко Н.М.¹, Марчук О.В.¹, Федорчук А.О.².

¹ Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Волі 13, м. Луцьк, 43025,
e-mail: blashko.nazarai@vnu.edu.ua

² Львівський національний університет ветеринарної медицини та біотехнологій імені С.Ж. Гжицького,
вул. Пекарська, 50, м. Львів, 79010, e-mail: ft@ua.fm

У роботі представлено результати дослідження кристалічної структури сульфїду складу $\text{Nd}_3\text{Ag}_{0.45}\text{Ga}_{1.52}\text{S}_7$ як перспективного матеріалу, що може генерувати цікаві нелінійнооптичні та електричні властивості.

Синтез зразка масою один грам для дослідження кристалічної структури $\text{Nd}_3\text{Ag}_{0.45}\text{Ga}_{1.52}\text{S}_7$ проводили з простих речовин із вмістом основного компонента не менше 99.99 мас. % в електричній муфельній печі з програмним управлінням технологічними процесами МП-30. Синтез у вакуумованому (10^{-2} Па) кварцевому контейнері здійснювали згідно технологічного режиму: нагрів до температури 700 °С зі швидкістю 40 °С/год; витримка за температури 700 °С (10 годин); нагрів до температури 1100 °С зі швидкістю 12 °С/год; витримка за температури 1100 °С (2 години); охолодження до температури 500 °С зі швидкістю 6 °С/год; гомогенізуючий відпал за температури 500 °С (240 годин); гартування синтезованого зразка у воду за кімнатної температури без розгерметизації контейнера.

Розрахунок основних параметрів структури синтезованої фази проводили за дифрактограмою, яка була одержана в межах $2\Theta = 10 - 100^\circ$ на рентгенівській установці ДРОН 4-13 з параметрами зйомки: $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання; крок сканування – $0,05^\circ$, експозиція у кожній точці – 10 с. Розрахунок кристалічної структури проведено методом Рітвельда (пакет програм WinCSD) [1]. Візуалізацію кристалічної структури виконано за допомогою програми VESTA 3.5.7 [2].

Уточнення координат та ізотропних теплових параметрів атомів у структурі синтезованого сульфїду (таблиця 1) призвело до відносно задовільних значень R-факторів.

Спостережувана, розрахована та різницева між ними дифрактограми сульфїду $\text{Nd}_3\text{Ag}_{0.45}\text{Ga}_{1.52}\text{S}_7$ представлені на рисунку 1.

Елементарну комірку та координаційні поліедри [Nd 7S], [Ga 6S] і $[\text{G}\{0.450\text{Ag}+0.520\text{Ga}\} 4\text{S}]$ у структурі одержаного сульфїду зображено на рисунку 2.

Кристалічна структура сульфїду $\text{Nd}_3\text{Ag}_{0.45}\text{Ga}_{1.52}\text{S}_7$ (СТ $\text{La}_3\text{CuSiS}_7$ [3]; ПГ $P6_3$, СП $hP24,173$) з параметрами елементарної комірки: $a = 9.9233(5) \text{ \AA}$, $c = 6.0724(5) \text{ \AA}$ та $V = 517.8(1) \text{ \AA}^3$, сформована тригональними призмами [Nd (ПСТ 6c) 7S]. Тригональні призми утворюють “блоки” 3 [Nd 7S]. У цих “блоках” тригональні призми між собою з’єднані ребрами.

Для атомів Ga, характерною є октаедрична координація (КЧ = 6). Октаедри [Ga (ПСТ 2a) 6S] мають спільні грані та в напрямку осі c утворюють колони.

Введення у структуру тернарного сульфїду $\text{Nd}_3\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$ [4] атомів одновалентного металу спричиняє значне спотворення октаедрів [Ga 6S]: $\chi = 0.00844$ (для $\text{Nd}_3\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$) та $\chi = 0.04291$ (для $\text{Nd}_3\text{Ag}_{0.45}\text{Ga}_{1.52}\text{S}_7$).

Для атомів статистичної суміші $\text{G}\{0.450 \text{ Ag} + 0.520 \text{ Ga}\}$, що займають ПСТ 2b, характерною є тетраедрична координація (КЧ = 4). Незначний індекс спотворення

тетраєдрів [G 4S] (0.00160 для $\text{Nd}_3\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$, 0.00135 для $\text{Nd}_3\text{Ag}_{0.45}\text{Ga}_{1.52}\text{S}_7$) свідчить про їх високу симетричність.

Вище зазначені особливості у симетрії полієдрів, дозволяють стверджувати, що введенням у структуру лантанодновмісних халькогенідів атомів хімічних елементів різної природи, можна корегувати геометричні параметри полієдрів. А отже, синтезувати матеріали з наперед заданими кристалічною структурою та фізичними властивостями.

Розраховані параметри полієдрів у структурах сульфідів представлено у таблиці 2.

Таблиця 1

Координати та ізотропні параметри теплового коливання атомів у структурі сульфїду $\text{Nd}_3\text{Ag}_{0.45}\text{Ga}_{1.52}\text{S}_7$

Атоми	ПСТ	x/a	y/b	z/c	$B_{\text{ізо}} \times 10^2 (\text{Å}^2)$
Nd	6c	0,3774(4)	0,2272(3)	0,2131(11)	1,00(6)
Ga	2a	0	0	0,055(2)	1,0(5)
G	2b	1/3	2/3	0,1476(13)	1,00(13)
S1	6c	0,084(2)	0,244(2)	0,273(2)	1,0(4)
S2	6c	0,524(2)	0,104(2)	0,500(3)	1,0(3)
S3	2b	1/3	2/3	0,505(4)	1,0(6)

G – 0.45 Ag + 0.52 Ga

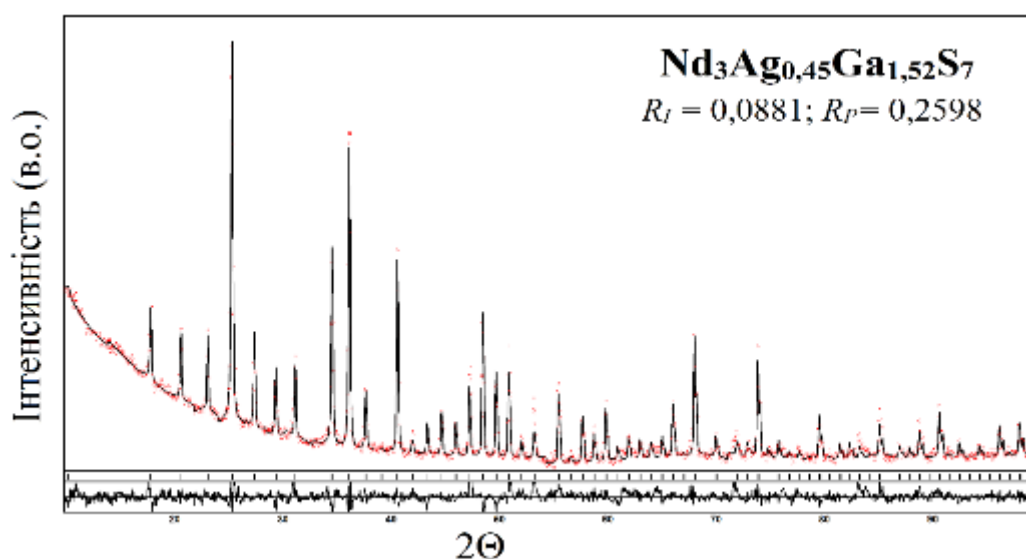


Рис. 1. Експериментальна і теоретична дифрактограми сульфїду $\text{Nd}_3\text{Ag}_{0.45}\text{Ga}_{1.52}\text{S}_7$ та їх різницева.

Таблиця 2

Параметри полієдрів у структурах $\text{Nd}_3\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$ та $\text{Nd}_3\text{Ag}_{0.45}\text{Ga}_{1.52}\text{S}_7$

Параметри	$\text{Nd}_3\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$	$\text{Nd}_3\text{Ag}_{0.45}\text{Ga}_{1.52}\text{S}_7$
Тригональна призма з одним додатковим атомом [Nd 7S]		
Середня довжина зв'язку, Å	2.9117	2,9036
Об'єм полієдра, Å ³	34.0763	34,2667
Коефіцієнт дисторції (χ)	0.02422	0,02587

Ефективне координаційне число	6.7668	6,6908
Октаедр [Ga 6S]		
Середня довжина зв'язку, Å	2.5597	2.6221
Об'єм поліедра, Å ³	22.3321	23.9052
Коефіцієнт дисторсії (χ)	0.00844	0.04291
Ефективне координаційне число	5.9851	5.5456
Тетраедр [G {0.45 Ag + 0.52 Ga} 4S]		
Середня довжина зв'язку, Å	2.2327	2.1785
Об'єм поліедра, Å ³	5.6627	5.2517
Коефіцієнт дисторсії (χ)	0.00160	0.00135
Ефективне координаційне число	3.9995	3.9997

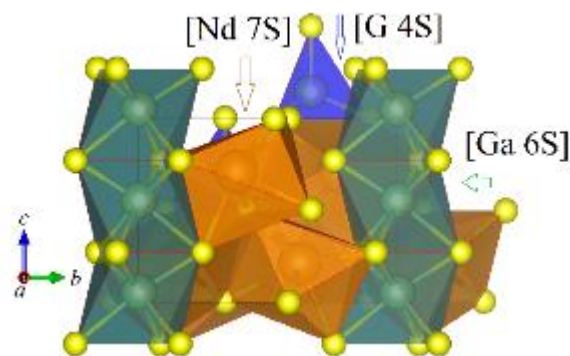


Рис. 2. Елементарна комірка та координаційні поліедри атомів у структурі сульфїду $\text{Nd}_3\text{Ag}_{0.45}\text{Ga}_{1.52}\text{S}_7$.

З огляду на те, що для синтезованого сульфїду характерною є нецетросиметрична (ПГ $P6_3$) структура, він може бути використаний як матеріал для дослідження нелїнійнооптичних та інших характеристик.

Список літератури

- [1]. Akselrud L., Grin Y. *WinCSD: Software package for crystallographic calculations (Version 4)*, J. Appl. Cryst., 47, 803 (2014).
- [2]. Momma K., Izumi F. *VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data*, J. Appl. Cryst., 44, 1272 (2011).
- [3]. Guittard M., Julien-Pouzol M. *Les composés hexagonaux de type $\text{La}_3\text{CuSiS}_7$* , Bulletin de la Societe Chimique de France, 6, 2207 (1972).
- [4]. Patrie M., Guittard M. *Chimie minerale. Sur les composés du type $\text{Ce}_6\text{Al}_{10/3}\text{S}_{14}$* , C. R. Acad. Sci., C, 268, 1136 (1969).

ФОТОРЕФРАКТИВНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОДВІЙНО ЛЕГОВАНИХ КРИСТАЛІВ ТІОГШОДИФОСФАТУ ОЛОВА

**О. О. Грабар, М. В. Цигика, В. Ю. Волошин, А. А. Когутич,
К. Є. Глухов, Р. Є. Павлишин**

*Інститут фізики і хімії твердого тіла,
Ужгородський національний університет,
вул. Підгірна 46, м. Ужгород, 88000
alexander.grabar@uzhnu.edu.ua*

Кристали $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ відомі як ефективні фоторефрактивні матеріали, параметри яких можуть бути ефективно модифіковані їх легуванням [1,2]. Наші дослідження були спрямовані на пошук нових ефективних легуючих елементів та їх комбінацій, які забезпечуються двома основними методами, а саме: вирощуванням монокристалів з двома домішками, та дифузією металів (Cu, Ag) у попередньо вирощені зразки [3]. У даному повідомленні представлені результати досліджень оптичних і фоторефрактивних параметрів легованих кристалів, зокрема зразків $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6:(\text{Sb},\text{Cu})$, які демонструють найкращі параметри.

В ході роботи вирощувались різні подвійно леговані зразки $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ з використанням традиційної методики хімічних транспортних реакцій. Зокрема таким методом отримувалися зразки з різними концентраціями Sb та Te, які, як було показано раніше [1,2], є найефективнішими для фоторефрактивного ефекту домішками, а також леговані одним з двох металів, Ag і Cu, які також використовувалися для модифікації $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ методом термоіндукованої дифузії з поверхні [3]. Встановлено, що найперспективнішою сполукою для фоторефрактивних застосувань є $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$, легований комбінацією Cu і Sb, з рівними концентраціями (близько 1 мол.%). Інші комбінації легування, такі як Te+Cu, Te+Ag та Sb+Ag, не привели до покращення фоторефрактивних параметрів, і водночас продемонстрували підвищену темнову провідність. Тому основна увага була приділена кристалам, легованим комбінацією Sb+Cu.

Вимірювання спектрів оптичного пропускання поблизу краю поглинання у цих зразках показали, що вони загалом подібні до випадку кристалів $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ легованих лише Sb. Експерименти з фоторефрактивної двохвильової взаємодії з використанням випромінювання He-Ne лазера (633 нм) показали, що максимальні значення коефіцієнта підсилення становлять величину порядку $\Gamma=15 \text{ см}^{-1}$ (при періоді ґратки 1 мкм та інтенсивності лазерного променя $0,3 \text{ Вт}\cdot\text{см}^{-2}$). Встановлено також, що коефіцієнт підсилення Γ залежить від інтенсивності світла, і цього величина зменшується до 10 см^{-1} при інтенсивності $0,1 \text{ Вт}\cdot\text{см}^{-2}$, що є меншим порівняно з кристалом $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6:\text{Sb}1\%$ [1,2]. Проте головною перевагою фоторефрактивного ефекту в зразках $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6:(\text{Sb},\text{Cu})$ є практично моноекспоненціальна динаміка формування динамічної голограми, тобто запис ґратки просторового заряду відбувається практично без компенсаційних процесів, які зазвичай спостерігаються в інших легованих (а також інших подвійно легованих) кристалах $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$. Крім того, підсилений сигнальний промінь демонструє високу стабільність у порівнянні з випадком легованого Sb кристалу $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$.

Отримані експериментальні результати добре корелюють з моделюванням, виконаним шляхом *ab initio* розрахунків електронних спектрів ґратки $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ з різними дефектами. Такі розрахунки дають інформацію про енергію дефектних рівнів у забороненій зоні, а також про найімовірніші положення домішки, які можна визначити за мінімізацією повної енергії комірки при різних позиціях дефектів. Також дана модель дозволяє оцінити індуковані домішкою зміни фізичних параметрів кристала.

Моделльний розрахунок електронних спектрів у ґратці $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ з двома дефектами (тобто домішками Cu і Sb в одній елементарній комірці) дає імовірне пояснення відсутності процесів компенсації у такому подвійно легovanому кристалі. Як показали попередні дослідження спектрів фото-ЕПР [4], домішка Sb^{3+} типово заміщує катіони Sn^{2+} , і кристалічна структура є зарядово скомпенсованою за рахунок появи додаткових вакансій Sn . Це призводить до утворення дефектів двох типів, тобто домішки і вакансії, що може бути однією з причин електрон-діркової компенсації при формуванні фоторефрактивних голограм в кристалах, легованих лише Sb . Домішка Cu^{1+} , розташована поблизу Sb^{3+} , може частково компенсувати вакансії Sn . Як впливає з розрахованих електронних спектрів, додаткові електронні стани, що виникають на адатомах Sb і Cu , відповідають однакової енергії, і мають навіть частково перекриті електронні орбіти, отже формують єдиний дефектний електронний рівень у забороненій зоні. Це корелює з моноекспоненціальною динамікою формування ґратки просторового заряду, що передбачається класичною однорівневою моделлю фоторефрактивного ефекту.

Кристали, леговані $\text{Sb}+\text{Cu}$, завдяки достатньо високому коефіцієнту енергообміну на довжині хвилі 633 нм та часовій стабільності, дозволяють реалізовувати на їх основі різноманітні практичні фоторефрактивні схеми. В роботі це проілюстровано на прикладі дослідження характеристик двох оптичних схем, а саме: динамічного інтерферометра на основі двохвильової взаємодії та напівплінійного осцилятора з високою ефективністю та низьким порогом генерації порівняно з іншими легованими фоторефрактивними зразками $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$.

Таким чином, легування кристалів $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ комбінацією Sb і Cu є перспективним методом покращення їх фоторефрактивних параметрів. Така модифікація дозволяє отримати фоторефрактивні динамічні голограми, які є стабільними в часі і не демонструють значних компенсаційних процесів.

Список літератури

- [1] T. Bach, M. Jazbinšek, G. Montemezzani, P. Günter, A. Grabar, and Yu. Vysochanskii, *J. Opt. Soc. Am. B* 24, 1535 (2007).
- [2] A. A. Grabar, M. Jazbinšek, A. N. Shumelyuk, Yu. M. Vysochanskii, G. Montemezzani and P. Günter. Photorefractive effects in $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$. In: "Photorefractive Materials and Their Applications II". Springer, New York 327 (2007).
- [3] V. Shvalya, J. Zavašnik, V. Nasretdinova, H. Uršič, J. Kovač, A. Grabar, A. Kohutych, A. Molnar, D. R. Evans, D. D. Mihailović, U. Cvelbar, *J. Mater. Chem. C* 8, 9975 (2020).
- [4] B. E. Kananen, E. M. Golden, S. A. Basun, D. R. Evans, A. A. Grabar, I. M. Stoika, W. McClory, N. C. Giles, L. E. Halliburton, *Optical Materials Express* 6(12), 3992 (2016).

ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ДЕТЕКТОРИ В РЕТРОСПЕКТИВНІЙ ДОЗИМЕТРІЇ

Замуруєва О.В., Балюк О., Бондарчук М.,

Білоус П., Костевич В., Івановський А.В., Фляк А.

Волинський національний університет імені Лесі Українки,

кафедра теоретичної та комп'ютерної фізики імені А.В. Свідзинського,

пр. Волі, 13, Луцьк, 43000, Україна

e-mail: Sakhnyuk.Vasyl@vnu.edu.ua

Поглинена доза є основною величиною, яка використовується в дозиметрії. Вона визначається, як кількість енергії іонізуючого випромінювання, поглиненої одиницею маси опроміненої речовини. Одиницею поглиненої дози є джоуль на кілограм [Дж/кг], що відповідає енергії одного джоуля будь-якого іонізуючого випромінювання, поглиненого масою одного кілограма опроміненої речовини. У системі СІ одиниця поглиненої дози називається грей [Гр], 1 Гр = 1 Дж/кг [1]. Позасистемною одиницею поглиненої дози є рад. Один рад дорівнює поглиненій енергії в 10^{-5} Дж/кг будь-якій речовині, 1 рад = 10^{-5} Дж/кг = 0,01 Гр.

У разі радіаційної надзвичайної ситуації в областях, де стандартні детектори недоступні, для оцінки поглиненої дози можуть бути використані такі матеріали як: кварц, що міститься в цеглі та кераміці; цемент; інтегральні схеми, SIM-карти, пил, зубна емаль, грошові купюри, банківські картки, візитки, скло годинників, крила комах та інші подібні матеріали.

Протягом останніх 40 років для оцінки доз опромінення населення використовували керамічні матеріали. Цементні матеріали різних видів є цікавою альтернативою кераміці, оскільки вони містять наповнювачі з дрібного або зернистого кварцу [1].

В роботі [2] повідомлено про використання емалі зубів в якості «аварійного детектора» (Рис.1,2). Встановлена лінійна дозова залежність.



Рис.1. Загальний вигляд зразків [2].

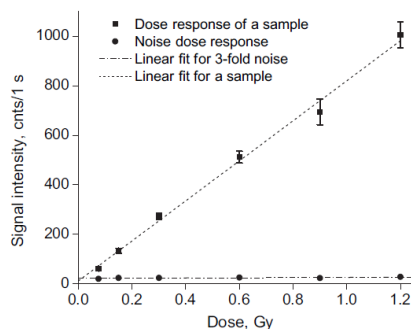


Рис.2. Дозова залежність репрезентативного зразка [2].

Таким чином, емаль зубів може бути використана в екстренній дозиметрії [2].

Чіпи кредитних карт, які видані різними американськими банками, були предметом дослідження, яке проводили Шолом і МакКівер (Рис.3,4) [3].

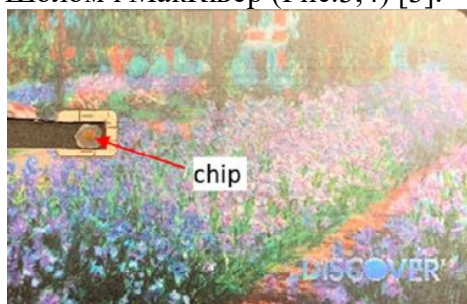


Рис.3. Фото кредитної картки з чіпом [3]

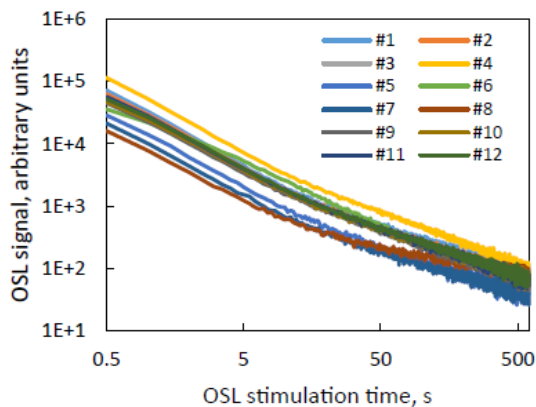


Рис.4. Вихідні сигнали ОСЛ від 12 кредитних карток, опромінених дозою 7 Гр [3].

Характеристики дози для досліджуваних зразків були лінійними в діапазоні 0–7 Гр. Значення мінімальної виявленої дози становили від 7,9 мГр до 26,3 мГр [3].

1. Bailiff I. K., Sholom S., McKeever S. W. (2016). Retrospective and emergency dosimetry in response to radiological incidents and nuclear mass-casualty events: a review. *RadiationMeasurements*. 2016. V. 94. P.83-139.
2. Sholom S., DeWitt R., Simon S. L., Bouville A., McKeever S. W. (2011). Emergency dose estimation using optically stimulated luminescence from human tooth enamel. *RadiationMeasurements*. 2011. V.46(9). P. 778–782.
3. Sholom S., McKeever S. W. OSL with chips from US credit cards. *Radiation Measurements*. 2021. V. 141. 106536.

ФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛУ $Tl_2CdSnSe_4$

Д.О. Іванюк¹, Л.В. Піскач², А.Г. Кевшин¹

¹Аспірант Волинського національного університету імені Лесі Українки

²Доцент Волинського національного університету імені Лесі Українки

³Доцент Волинського національного університету імені Лесі Українки

dima.ivaniuk29@gmail.com, piskach.lyudmyla@vnu.edu.ua, Kevsyn_A@ukr.net

Для створення нових ефективних оптико-електронних приладів використовують халькогенідні напівпровідники, що містять лужні метали. Іони Tl^+ подібні до іонів лужних металів, тому заміна атомами талію атомів лужного металу чи міді/срібла в алмазоподібній фазі можуть давати ізоструктурні сполуки [1]. Окрім цього, Tl має ряд властивостей, що допоможуть Tl -вмісним сполукам уникнути недоліків сполук з лужних металів, а саме: електронегативність Tl набагато вища ніж лужного металу; Tl важчий за лужний метал; Tl^+ має неподілену пару електронів, яка може бути активною [2]. Всі ці переваги означають, що халькогеніди талію є перспективним об'єктом досліджень і можуть стати альтернативами халькогенідів на основі лужних металів.

Відомо, що для розуміння фізико-хімічних властивостей твердих тіл потрібно знати про особливості утворення хімічних зв'язків та електронну будову кристалів. Також це дає змогу передбачити, які потрібно провести модифікації, щоб сполука відповідала технічним вимогам. Дослідження оптичних властивостей кристалів є основним параметром для їх подальшого використання в різноманітних приладах [3].

Згідно експерименту $Tl_2CdSnSe_4$ є прямозонним напівпровідником р-типу із шириною забороненої зони в межах 1,0–1,5 eV [4]. Це є важливим параметром для напівпровідників, які використовуються в оптоелектроніці. Досліджуваний кристал є фоточутливим, що робить його багатообіцяючим для використання в сонячній енергетиці. Поверхня сполуки є досить стабільною і в поєднанні з відповідною шириною забороненої зони робить даний селенід дуже перспективним напівпровідником для використання в тонкоплівкових сонячних елементах, а також для застосування у високоефективних фотокаталітичних і фотоелектричних пристроях [5]. Низька гігроскопічність поверхні кристала $Tl_2CdSnSe_4$ може дати змогу використовувати його в оптико-електронних пристроях, що працюють в умовах підвищеної атмосферної вологості, а також в навколишньому середовищі [5]. Високою перспективністю використання кристалу в оптоелектронних приладах є те, що $Tl_2CdSnSe_4$ є світлочутливим напівпровідником з областю сильного поглинання від червоного кольору видимого світла до вакуумного ультрафіолету [5].

Кристали $Tl_2CdSnSe_4$ є ще недостатньо вивченими. В теперішній час інтенсивно проводяться дослідження даних сполук, тому що вони представляють великий інтерес для практичного використання.

Selezen, A.O., Piskach, L.V., Parasyuk, O.V. *et al.* The Tl_2SnSe_3 -CdSe System and the Crystal Structure of the $Tl_2CdSnSe_4$ Compound. *J. Phase Equilib. Diffus.* **40**, 797–801 (2019).

1. Karkour, S., Bouhemadou, A., Allali, D. *et al.* Structural, elastic, electronic and optical properties of the newly synthesized selenides Tl_2CdXSe_4 ($X = Ge, Sn$). *Eur. Phys. J. B* **95**, 38 (2022).

2. A.A. Lavrentyev, B.V. Gabrelian, V.T. Vu, L.N. Ananchenko, L.I. Isaenko, A.P. Yelisseyev, O.Y. Khyzhun, Electronic structure and optical properties of noncentrosymmetric $LiGaSe_2$: experimental measurements and DFT band structure calculations, *Opt. Mater.* **66** (2017) 149–159.

3. B.V. Gabrelian, A.A. Lavrentyev, T.V. Vu, V.A. Tkach, O.V. Marchuk, K.F. Kalmykova, L.N. Ananchenko, O.V. Parasyuk, O.Y. Khyzhun, Quaternary $Cu_2HgGeSe_4$ selenide: its electronic and optical properties as elucidated from TBmBJ band-structure calculations and XPS and XES measurements. *Chem. Phys.* **536** (2020) 110821

4. T.V. Vu, A.A. Lavrentyev, B.V. Gabrelian, A.O. Selezen, L.V. Piskach, G.L. Myronchuk, M. Denysyuk, V.A. Tkach, K.D. Pham, O.Y. Khyzhun, Crystal growth, electronic and optical properties of $Tl_2CdSnSe_4$, a recently discovered prospective semiconductor for application in thin film solar cells and optoelectronics. *Opt. Mater.* **111**, 110656–110712 (2021)

Оптичні властивості стекел системи $\text{GeS}_2\text{-As}_2\text{S}_3$

Кириченко Максим, Мирончук Галина, Марчук Олег
Волинський національний університет імені Лесі Українки,
Луцьк, Україна
Kyrychenko.Maksym@vnu.edu.ua

Оптичні властивості халькогенідних стекел привертають все більшу увагу науковців по всьому світі. Це обумовлено можливістю їх застосування в лазерній та світловипромінюючій техніці, безпілотній навігації та ін.

Передбачити властивості стекел з використанням тільки теорії процесів поглинання та випромінювання світла на практиці дуже складно, тому дослідження впливу домішок на оптичні властивості халькогенідних стекел лежить у експериментальній площині.

Однією з найбільш перспективних домішок в халькогенідних стеклах є Ербій. Цей елемент використовується в різноманітних галузях таких як енергетика, хірургія, оптика, лазерна техніка та інше. Таке різноманіття застосувань Ербію пов'язане з його властивістю ефективно випромінювати кванти певних електромагнітних хвиль під дією збуджуючих чинників. Ефективність випромінювання іонами Ербію залежить, насамперед, від їх концентрації в матриці, в яку його введено та компонентного складу останньої [1].

Для отримання розширеної та нової інформації щодо впливу Ер та структури халькогенідних стекел нами було проведене дослідження спектрів поглинання та пропускання в ІЧ діапазоні стекел систем $\text{GeS}_2\text{-As}_2\text{S}_3\text{-Er}_2\text{S}_3$ з різним співвідношенням компонентів GeS_2 та As_2S_3 . Спектр інфрачервоного пропускання халькогенідних стекел отримано за допомогою фур'є-спектрометра SHIMADZU IRAffinity-1S у діапазоні частот $700 - 7000 \text{ cm}^{-1}$ (Рис.1).

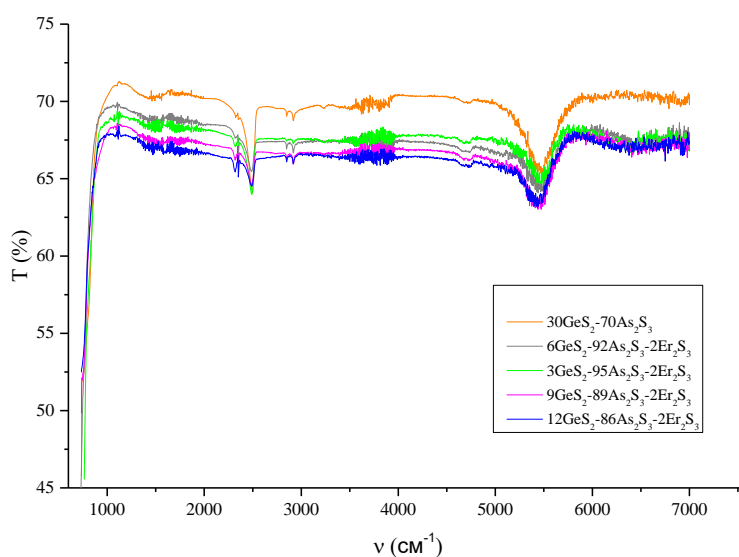


Рис.1 Спектри пропускання стекел систем $\text{GeS}_2\text{-As}_2\text{S}_3\text{-Er}_2\text{S}_3$ в ІЧ діапазоні.

В результаті проведених вимірювань помічений вплив домішкових елементів, які пов'язані з групами атомів: S-S, SH₂, S-H, S-OH, H₂O. [2,3,4]. Поява даних домішкових елементів зумовлена технологічними процесами виготовлення зразків стекол, а також впливом зовнішнього середовища безпосередньо після синтезу. Різке зменшення прозорості із низькочастотної області зумовлене мультифотонними процесами.

З результатів дослідження видно (Рис.1), що наявність Ербію в халькогенідному склі зміщує коефіцієнт пропускання в широкому спектральному діапазоні на 2-4 %, але залишається в межах 70 – 65 %, що підтверджує перспективи застосування таких стекол в техніці, яка працює в ІЧ діапазоні.

Література:

[1] В.В.Галян. Дисертація. Випромінювання світла в халькогенідних монокристалах систем Ga–In(La)–S та склоподібних сплавах утворених бінарними халькогенідами Ag₂S(Se), HgS, Ga(La)₂S(Se)₃, GeS₂ легованих ербієм. 2020. УДК 538.958; 539.213; 620.192.41

[2] Matthieu Chazot, Mohammed El Amraoui, Steeve Morency, Anouar Hanafi, Younès Messaddeq, et al.. Thermal characterizations and investigation of the drawing region in Ge-As-S glasses for IR optical fibers. Journal of Non-Crystalline Solids, 2019, 510, pp.186 - 191. 10.1016/j.jnoncrysol.2018.12.022 . hal-03486043

[3] Монографія : Атмосферна корозія телекомунікаційних оптичних середовищ для халькогенідної фотоніки: склоподібний і кристалічний дисульфід германію / Міца В., Голомб Р., Ловас Г., Кондраат О., Вереш М., Цитровський А., Хіміч Л., Чіке А., за редакцією Міца В. // Вид-во "Бреза", Ужгород, 2017. - 126 с.

[4] A.P. Paiuk, Alexander V. Stronski, Alexander V. Stronski, M.V. Vuichyk, M.V. Vuichyk, Show all 6 authors, P.F. Oleksenko / Mid-IR impurity absorption in As₂S₃ chalcogenide glasses doped with transition metals May 2012 Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics 15(2):152-156 DOI: 10.15407/spqeo15.02.152

ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ СЕНСОРИ В МЕДИЦИНІ

Никируй Л.І.¹, Замуруєва О.В.², Федосов С.А.³, Яворський Р.С.¹, Базилюк В.І.⁴, Набойчик С. С.

¹*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, Івано-Франківськ, Україна;*

²*Волинський національний університет імені Лесі Українки, Луцьк, Україна;*

³*Луцький національний технічний університет, Луцьк, Україна;*

⁴*Луцький медичний інститут, Луцьк, Україна*

e-mail: Zamurueva.O@gmail.com

Шкіра є органом людського тіла, яка представляє діагностичний інтерфейс, насичений життєво важливими біологічними сигналами від внутрішніх органів, кровоносних судин, м'язів і дерми/епідермісу. М'які, гнучкі та розтяжні електронні пристрої створюють нову платформу для взаємодії з м'якими тканинами для роботизованого зворотного зв'язку та контролю, регенеративної медицини і постійного моніторингу здоров'я.

У першій частині [1] розглядаються матеріали, стратегії проектування та системи живлення, що використовуються в програмній електроніці, представлено огляд застосування цих пристроїв у кардіології, дерматології, електрофізіології та діагностиці поту з наголосом на тому, як ці системи можуть замінити звичайні клінічні інструменти. Огляд завершується поглядом на поточні виклики та можливості для майбутніх напрямків досліджень у сфері моніторингу здоров'я переносних пристроїв.

Застосування матеріалів, що розтягуються, і матеріалів, що самовідновлюються, включає, але не обмежується цим, електроніку, дисплеї, енергетику, навколишнє середовище та медицину. Хоча більшість органічних матеріалів, як правило, можна зробити гнучкими, такі матеріали не розтягуються, що є ключовою механічною властивістю, необхідною для реалізації застосувань електронної шкіри для протезування, штучного інтелекту, систем робототехніки, персонального моніторингу здоров'я, біосумісності та зв'язку пристроїв. Публікація [2] охоплює деякі з найновіших досягнень у розтяжних і самовідновлюваних полімерах і пристроях для електронної шкіри (E-skin). Авторами досліджено матеріали, які використовуються в різних компонентах електронних пристроїв, розглянуто останні досягнення в розтяжних і самовідновлювальних провідниках, напівпровідниках і підкладках. Наголошується на деяких ключових технологіях, нещодавно розроблених у розтяжних сенсорах на органічній основі, сонячних елементах, світлодіодах та електронних пристроях із самовідновленням.

Терагерцове випромінювання використовується в різних сферах – від безпеки до медицини. Однак чутливе виявлення терагерцового випромінювання при кімнатній температурі, як відомо, складно. У [3] продемонстровано графеновий термоелектричний терагерцевий фотодетектор із чутливістю понад 10 ВВт^{-1} (700 ВВт^{-1}) за кімнатної температури та еквівалентною потужністю шуму менше $1100 \text{ пВтГц}^{-1/2}$ ($20 \text{ пВтГц}^{-1/2}$), що відноситься до інциденту (поглинається) потужність. Проста модель відповіді, включаючи контактні асиметрії (опір, роботу виходу та закріплення енергії Фермі), відтворює якісні характеристики даних і вказує на те, що можливе покращення чутливості на порядок.

Носимий електронний трикотаж останнім часом привертає увагу як дослідників, так і промислових секторів. Поєднання технологій в'язання з електронікою може стати домінуючим трендом у майбутньому. Необхідно розробити аналітичне рівняння для

модельовання складної резистивної мережі для даного набору провідних стібків, щоб задовольнити високий попит на швидке проектування прототипів розумного трикотажу. У документі [4] описано роботу, виконану для отримання аналітичних рівнянь для модельовання даної резистивної мережі провідних в'язальних стібків, створених із провідної пряжі та заснованих на поширених техніках в'язання інтарсії та трикотажу. Результати експерименту показали, що отримані рівняння можуть точно модельовати еквівалентний електричний опір провідних стібків трикотажу та можуть значно спростити існуючі моделі.

Електроніка для шкіри з автономним живленням, здатна збирати енергію та контролювати стан здоров'я, розглядається як носима система наступного покоління з широким застосуванням як для академічних досліджень штучного інтелекту, так і для клінічної практики охорони здоров'я. Продемонстровані приклади шкірної електроніки з автономним живленням включають різні типи пристроїв, пов'язаних із перетворенням енергії з п'єзоелектрики, трибоелектрики, біопаливних елементів, фотоелектричної енергії та термоелектрики в джерело електричної енергії. У огляді [5] підсумовуються останні досягнення в цій галузі з акцентом на складових матеріалах, конфігурації пристроїв, функціональності системи та методах інтеграції за останні 5 років. Крім того, наступний розділ містить пов'язані програми цих електронних платформ, з акцентом на збір енергії та охорону здоров'я для моделей людського тіла та тварин. Наприкінці статті обговорюються проблеми та можливості для електроніки шкіри з автономним живленням, пропонуючись інформації та дослідницьких ідей для читачів. Ці досягнення створюють основу для пристроїв з автономним живленням в електричних зовнішніх інтерфейсах майбутнього, де ці передові технології пропонують широку актуальність для різноманітної інтегрованої в зовнішню електроніку.

У роботі [6] описується використання настільного принтера для виготовлення епідермальних паперових електронних пристроїв (EPED). Ця технологія виготовлення є простою, недорогою та сумісною з масштабованими виробничими процесами. EPED виготовляються з використанням паперових підкладок, які стають омніфобними завдяки економічно вигідній силанізації фторалкілтрихлорсиланами, що робить їх недорогими, водостійкими та механічно сумісними з людською шкірою. Високопровідні чорнила або тонкі плівки, прикріплені до однієї зі сторін омніфобного паперу, роблять EPED сумісними з додатками, які можна носити, включаючи бездротову передачу енергії. Омніфобні целюлозні волокна EPED забезпечують незалежне від вологи механічне зміцнення провідного шару. EPED точно контролює фізіологічні сигнали, такі як ЕКГ (електрокардіограма), ЕМГ (електроміограма) і ЕОГ (електроокулограма) навіть у середовищі з високою вологістю. Крім того, EPED можна використовувати для швидкого визначення температури на шкірі та для застосування локалізованої термотерапії. Дані результати демонструють переваги EPED як недорогої платформи для персоналізованих медичних програм.

1. Liu Y., Pharr M., Salvatore G.A. Lab-on-Skin: A Review of Flexible and Stretchable Electronics for Wearable Health Monitoring. *ACS Nano*. 2017. Vol. 11, № 10. P. 9614–9635.
2. Benight S.J., Wang C., Tok J.B.H., Bao Z. Stretchable and self-healing polymers and devices for electronic skin. *Progress in Polymer Science*. 2013. Vol. 38, № 12. P. 1961–1977.
3. Cai X., Sushkov A.B., Suess R.J., ...Drew H.D., Fuhner M.S. Sensitive room-temperature terahertz detection via the photothermoelectric effect in graphene. *Nature Nanotechnology*. 2014. Vol. 9, № 10. P. 814–819.
4. Li L., Wai Man au, Wan K.M., ...Chung W.Y., Wong K.S. A Resistive Network Model for Conductive Knitting Stitches. *Textile Research Journal*. 2010. Vol. 80, № 10. P. 935–947.
5. Wu M., Yao K., Li D., ...Yu J., Yu X. Self-powered skin electronics for energy harvesting and healthcare monitoring. *Materials Today Energy*. 2021. Vol. 21. 100786.
6. Sadri B., Goswami D., Martinez R.V. Rapid fabrication of epidermal paper-based electronic devices using razor printing. *Micromachines*. 2018. Vol. 9, № 9. 420.

ФАЗОВІ РІВНОВАГИ У КВАЗІБІНАРНИХ СИСТЕМАХ AgSb(Bi)S₂–Ag₈GeS₆

**Савчук Ілля Миколайович, Семенюк Віталія Олегівна,
Кньовець Анастасія Михайлівна, Гулай Любомир Дмитрович,
Козут Юрій Миколайович*, Піскач Людмила Василівна**

Волинський національний університет імені Лесі Українки

*e-mail: kogut.yuri@vnu.edu.ua

Тернарні та тетрарні халькогеніди срібла є перспективними напівпровідниковими матеріалами для практичного використання, що володіють різноманітними фізичними властивостями – оптичними, електричними, сегнетоелектричними, іонною провідністю тощо [1-4]. В системах Ag₂S–Sb(Bi)₂S₃–GeS₂ існують сполуки: AgSbS₂, AgBiS₂, Ag₃SbS₃, Ag₈GeS₆ та інші, що знайшли використання у твердотільній іоніці, оскільки мають значну катіонну провідність у твердому стані, а також володіють цінними фізико-хімічними і електро-фізичними властивостями [5-8]. Всі ці сполуки зустрічаються в природі у вигляді мінералів, містять екологічно чисті елементи [9-12]. Утворення нових сполук та твердих розчинів на основі аргентумовмісних сульфідів розширить коло цінних перспективних напівпровідникових матеріалів для техніки. В роботах [13, 14] представлена взаємодія в аналогічних системах із Станумом Cu(Ag)SbS₂–Cu(Ag)₈SnS₆. Між сполуками купрумівмісної системи протікає евтектичний процес; в аргентумівмісній системі при 920 К утворюється тетрарна сполука Ag₁₁Sb₃SnS₁₂, яка володіє поліморфізмом з переходом при 646 К.

Вихідними компонентами квазіпотрійних систем AgSb(Bi)S₂–SnS₂–Sb₂S₃ виступають потрійні сполуки AgSbS₂, AgBiS₂ та Ag₈GeS₆, які володіють конгруентним характером плавлення при 783 К [15], 1074 К [16], 1228 К [17] та мають поліморфні перетворення при 653 К, 468 К, 488 К відповідно.

Кристалографічні характеристики всіх модифікацій потрійних сполук наведено в табл. 1.

Таблиця 1. Кристалографічні параметри потрійних сполук у системах Ag₂S–Sb(Bi)₂S₃–GeS₂

НТМ- AgSbS ₂	ВТМ- AgSbS ₂	НТМ- AgBiS ₂	ВТМ- AgBiS ₂	НТМ- Ag ₈ GeS ₆	ВТМ- Ag ₈ GeS ₆
<i>C2</i>	<i>Fm-3m</i>	<i>R-3m</i>	<i>Fm-3m</i>	<i>Pna2₁</i>	<i>F4-3m</i>
<i>моноклінна</i>	<i>кубічна</i>	<i>ромбо- едрична</i>	<i>кубічна</i>	<i>ромбічна</i>	<i>кубічна</i>
1,2824	0,5653	0,407	0,5648	1,5149	1,070
0,4406	...	-	...	0,7476	...
1,3193	...	1,906	...	1,0589	...
<i>β=98,6°</i>	...	-
[18]	[19]	[20]	[20]	[21]	[22]

Перерізи AgSb(Bi)S₂–Ag₈GeS₆ квазібінарні. Тверді розчини на основі потрійних сполук кристалізуються в ПГ *Cc* (AgSbS₂), ПГ *Fm-3m* (AgBiS₂) та ПГ *Pna2₁* (Ag₈GeS₆) (рис. 1 а, б). На основі AgSb(Bi)S₂ та Ag₈GeS₆ розчинність складає близько 5 мол. %.

При співвідношенні компонентів 3:1 в системі $\text{AgSbS}_2\text{-Ag}_8\text{GeS}_6$ утворюється нова тетрарна сполука складу $\text{Ag}_{11}\text{Sb}_3\text{GeS}_{12}$, яка має значну область гомогенності, що підтверджують результати рентгенофазового (рис. 1) та мікроструктурного аналізів – зразок є однофазним.

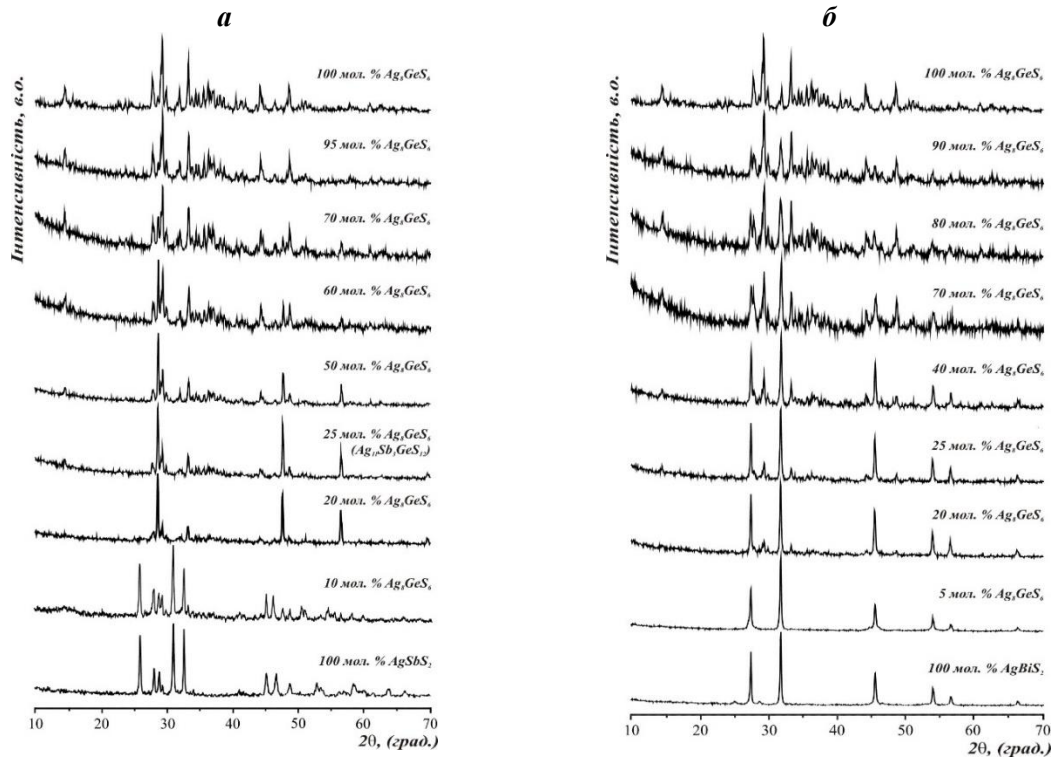


Рис. 1. Дифрактограми типових зразків систем $\text{AgSbS}_2\text{-Ag}_8\text{GeS}_6$ (а), $\text{AgBiS}_2\text{-Ag}_8\text{GeS}_6$ (б)

Кристалічна структура нової тетрарної сполуки досліджена рентгеноструктурним методом порошку (дифрактометр ДРОН 4-13 із використанням $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання в інтервалі $10^\circ \leq 2\theta \leq 100^\circ$ з кроком лічильника 0.02° , експозиція 10 с у точці). Сполука $\text{Ag}_{11}\text{Sb}_3\text{GeS}_{12}$ кристалізується у кубічній сингонії, ПГ $F4b3m$, параметр ґратки $a=0.54127(2)$ нм (рис. 2).

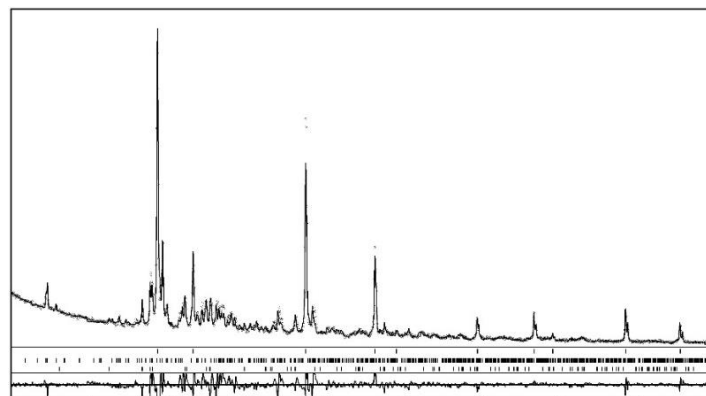


Рис. 3. Експериментальна, теоретична та різницєва дифрактограми для $\text{Ag}_{11}\text{Sb}_3\text{GeS}_{12}$

Між сполуками AgBiS_2 та Ag_8GeS_6 згідно з даними РФА та МСА наявна двофазна взаємодія. Результати РФА представлені на рис. 1 б. За даними ДТА переріз AgBiS_2 – Ag_8GeS_6 евтектичного типу: $\text{L} \leftrightarrow \alpha + \beta'$ (α , β' – тверді розчини на основі AgBiS_2 та Ag_8GeS_6 відповідно). Евтектична точка знаходиться при 970 К на складі 25 мол.% Ag_8GeS_6 . При 527 К протікає нонваріантний перитектоїдний процес $\text{L} + \beta' \leftrightarrow \beta$, оскільки Ag_8GeS_6 характерний фазовий перехід.

Список літератури

1. Khang Hoang, Subhendra D. Mahanti, Atomic and electronic structures of I-V-VI₂ ternary chalcogenides // J. Science: Advanced Materials and Devices, 1 (2016) 51-56. <https://doi.org/10.1016/j.jsamd.2016.04.004>
2. М.В. Мороз, П.Ю. Демченко, М.В. Прохоренко, Л.В. Соляк, С.В. Прохоренко, О.В. Решетняк, Термодинамічно стабільні фази системи Ag_9GaSe_6 – Ag_8GeSe_6 за $T < 600$ К та їхні фізико-хімічні властивості // Укр. хім. журн. 88 (2022) 25–36.
3. Xia Hua, Vinay I. Hegde, Christopher Wolverton, Phase Stability and Ordering in Rock Salt-Based Thermoelectrics: NaSbX_2 , AgSbX_2 , and Their Alloys with PbX and SnX ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) // Chem. Mater. 31 (2019) 9445–9452. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b03318>
4. Wu, Di and Li, Xiaojun and Ma, Baopeng and Liu, Shixuan and Li, Yaqin and Chao, Xiaolian and Yang, Zupei and He, Jiaqing, Modulated Fermi Level and Relaxed Lattice Strain Leading to Enhanced Thermoelectric Properties in AgSbSe_2 // ACS Appl. Energy Mater. 6 (2023) 530–536. <http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4254766>
5. Miargyrite AgSbS_2 . P. 2001-2005. Mineral Data Publishing, version 1. handbookof-mineralogy.org/pdfs/miargyrite.pdf.
6. Walenta K. Cuboargyrit, ein neues Silbermineral aus dem Schwarzwald // Lapis. 23 (1998) 21–23.
7. Kurt Walenta, Heinz Bernhardt, Thomas Theye, Cubic AgBiS_2 (schapbachite) from the Silberbrünnle mine near Gengenbach in the Central Black Forest, Germany // Neues Jahrb. Mineral., Monatsh. 9 (2004) 425-432. DOI: [10.1127/0028-3649/2004-0425](https://doi.org/10.1127/0028-3649/2004/2004-0425)
8. Clemens Winkler, Mittheilungen über das Germanium // J. Prakt. Chem. 36 (1887) 177-209. <https://doi.org/10.1002/prac.18870360119>
9. Golovach, I.I., Gerasimenko, V.S., Slivka, V.Y. et al. Vitrification of and optical and photoelectrical properties of AgAsS_2 , AgSbS_2 , and AgBiS_2 // Soviet Physics J. 19 (1976) 294–298/ <https://doi.org/10.1007/BF00945676>
10. Chen H.M., Maohua C., Adams S. Stability and ionic mobility in argyrodite-related lithium-ion solid electrolytes // Physical Chemistry Chemical Physics. 17 (2015) 16494–16506. doi: [10.1039/C5CP01841B](https://doi.org/10.1039/C5CP01841B)
11. Pogodin, A. I.; Filep, M. J.; Izai, V. Yu.; Kokhan, O. P.; Kúš, P. Crystal growth and electrical conductivity of Ag_7PS_6 and Ag_8GeS_6 argyrodites / J. Phys. Chem. Solids, 168 (2022) 110828. DOI: [10.1016/j.jpcs.2022.110828](https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2022.110828)
12. Ajiboye, T.O., Mafolasire, A.A., Lawrence, S. et al. Composite and Pristine Silver Bismuth Sulphide: Synthesis and Up-to-Date Applications. // J Inorg. Organomet. Polym. 34 (2024) 433–457. <https://doi.org/10.1007/s10904-023-02838-y>
13. Березнюк, О., Алрікік, М., Когут, Ю., Піскач, Л. Фазові рівноваги в системах $\text{Cu}(\text{Ag})_2\text{S}$ – Sb_2S_3 – SnS_2 // Проблеми хімії та сталого розвитку. 4 (2022) 17-30. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2022-4-2>
14. Berезniuk O., Smitiukh O., Piskach L. The Cu_2S – Sb_2S_3 – SnS_2 System // Proc. Shevchenko Sci. Soc. Chem. Sci. LXXIII (2023) 45-58. <https://doi.org/10.37827/ntsh.chem.2023.73.045>
15. Keighin C. W., Honea R. M. The System Ag – Sb – S from 600°C to 200°C // Mineralium Deposita. 4 (1969) 153–171. doi: [10.1007/bf00208050](https://doi.org/10.1007/bf00208050)
16. Tesfaye, F., Lindberg, D. Thermochemical properties of selected ternary phases in the Ag – Bi – S system. // J. Mater. Sci. 51 (2016) 5750–5759. <https://doi.org/10.1007/s10853-016-9877-8>
17. Chbani N., Cai X., Loireau-Lozac'h A. M., Guittard M. Ternaire argent-germanium-sulfure. Quasibinaire disulfure de germanium – sulfure d'argent. Conductivité électrique du verre le plus riche en argent // Mater. Res. Bull. 27 (1992) 1355–1361. [https://doi.org/10.1016/0025-5408\(92\)90101-5](https://doi.org/10.1016/0025-5408(92)90101-5)
18. Smith J. V., Pluth J. J., Han S. Crystal structure refinement of miargyrite AgSbS_2 // Mineral. Mag. 61 (1997) 671–675.
19. Tokbaeva K. A., Kovaleva I. S., Antonova L. I., Luzhnaya N. P. Reaction between AgAsS_2 and AgSbS_2 // Inorg. Mater. 11 (1975) 1119–1120.
20. Geller, S., Wernick, J. H. Ternary semiconducting compounds with sodium chloride-like structure: AgSbSe_2 , AgSbTe_2 , AgBiS_2 , AgBiSe_2 // Acta Cryst. 12 (1959) 46-54. <https://doi.org/10.1107/S0365110X59000135>
21. Eulenberger G. Die Kristallstruktur der Tieftemperaturmodifikation von Ag_8GeS_6 . Monatsh. Chem. 108 (1977) 901–913.
22. Gorochov O. Les composés Ag_8MX_6 ($M = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$ et $X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$). Bull. Soc. Chim. France. 6 (1968) 2263–2275.

ОПТИКО ЕЛЕКТРОННІ ПАРАМЕТРИ КРИСТАЛІВ $(\text{NH}_4)_3\text{ZnCl}_5$

А. Шаправський, Р. Брезвін, В. Стадник, П. Щепанський, А. Ларченко, М. Рудиш
Фізичний факультет, Львівський національний університет імені Івана Франка,
Кирила і Мефодія 8, 79000, Львів, Україна
ashpravsky@gmail.com

Кристали групи хлороцинкатів, до якої також можна віднести амоній пентахлороцинкат $(\text{NH}_4)_3\text{ZnCl}_5$, викликають значний науковий інтерес через характерну для них наявність температурних переходів між сегнетоелектричними, сегнетоеластичними та несумірними фазами, що спричиняють появу цікавих фізичних властивостей [1].

Кристали $(\text{NH}_4)_3\text{ZnCl}_5$ хорошої оптичної якості синтезовано методом повільного випаровування з водного розчину за кімнатної температури.

Ідентифікацію вирощених кристалів проведено на дифрактометрі STOE STADI. Структуру отриманих кристалів досліджено методом дифракції X-променів (рис.1). З експериментально отриманих дифрактограм методом Рітвельда уточнено параметри кристалічної структури: $a = 8.7212(2)$, $b = 9.8924(3)$, $c = 12.6405(3)$ Å, об'єм елементарної комірки $V = 1090.54(5)$ Å³. Рентгенівський фазовий аналіз зразка вказав на його практичну однофазність та дозволив ідентифікувати фазу – сполуку $[\text{NH}_4]_3\text{ZnCl}_5$ (власний структурний тип, просторова група $Pnma$, кількість формульних одиниць в елементарній комірці $Z = 4$).

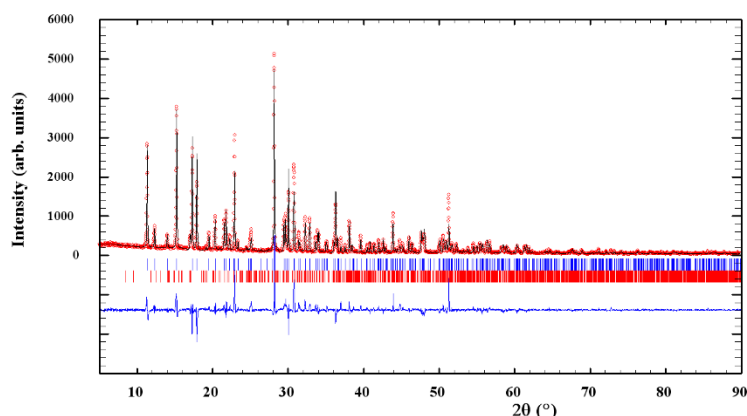


Рис.1. Дифрактограма кристала $(\text{NH}_4)_3\text{ZnCl}_5$

Проведено спектральні дослідження рефрактивних параметрів (показник заломлення, двопронезаломлення) кристалів $(\text{NH}_4)_3\text{ZnCl}_5$ за кімнатної температури. Встановлено, що для трьох поляризацій світла $E \parallel X$, $E \parallel Y$ та $E \parallel Z$ дисперсія показника заломлення в діапазоні 300...700 нм є нормальною ($dn/d\lambda < 0$) і задовільно описується двоосциляторною формулою Зельмейера. З наближенням до краю фундаментального поглинання показник заломлення $n_i(\lambda)$ у всіх напрямках стрімко зростає.

Література

1. Р. С. Брезвін, В. М. Габа, М. О. Романюк, В. Й. Стадник. Оптико-електронні параметри кристалів групи сульфатів та цинкатів. Монографія, Львів (2018), 242 с.

ВАХ КРИСТАЛІВ n -CdSb<Te> З РІЗНИМ ВМІСТОМ ЛЕГУЮЧОЇ ДОМІШКИ

Федосов С.А., Захарчук Д.А., Коваль Ю.В., Яциньський Л.В.

Луцький національний технічний університет, Луцьк, Україна,

e-mail: dima.zakharchuk@gmail.com

Професор Давидюк Г.Є. був невтомним популяризатором фізичної науки. Сфера наукових інтересів Георгія Євlampійовича охоплює питання фізики структурних дефектів у напівпровідникових матеріалах. Установлення механізмів утворення радіаційних дефектів і їх взаємодії з найбільш важливими технологічними домішками належить до основних наукових досягнень відображених у понад 200 наукових працях. В одному з останніх видань [1] розкрито проблему створення радіаційно стійких матеріалів електронної та оптоелектронної техніки, що має велике прикладне значення. Один з перших Давидюк Г.Є. створив модель, яка описувала механізми S-подібних вольт-амперних характеристик (ВАХ) антимоніду кадмію, опромінених швидкими нейтронами [2].

Наявність у кристалах антимоніду кадмію (CdSb) аномального кута між лініями зв'язків $\theta = 62^\circ 15'$, що значно відрізняється від кута тетраедричного зв'язку ($\theta = 109^\circ$), призводить до знаходження в «напруженому стані» бездомішкового матеріалу, а це неминуче сприяє утворенню дефектів і появі характерних для CdSb властивостей [3]. Легування CdSb домішками В, Si, S, Zn, As, Br, Te, Ge, в яких значення середнього валентного радіуса є меншим ніж в атомах Cd і Sb, призводить до деформації зв'язків в ґратці заміщеними атомами домішки в напрямку наближення їх до правильних тетраедричних, що «зміцнює» решітку і зменшує концентрацію дефектів.

Вивчення ВАХ проводилося у кристалах антимоніду кадмію з різним вмістом легуючої домішки телуру: 0,005 % Te, 0,05 % Te, 0,5 % Te при температурах рідкого азоту ($T = 78$ К) і вищих. За одержаними експериментальними даними побудовано залежності сили струму від прикладеної напруги $I = f(U)$ (рис. 1). Характер зміни ВАХ з різним вмістом легуючої домішки мав S-подібну форму, що є результатом ефекту лавиноподібного перемикавання з високоомного в низькоомний стан кристалів CdSb<Te> при зростанні прикладеної напруги. Наявність внутрішніх електричних полів між шарами росту було виявлено у роботах [4-6] при дослідженнях кінетичних ефектів у монокристалах антимоніду кадмію за різних фізико-активних впливів.

У залежності від прикладеної напруги U і струму I , що протікає через кристал n -CdSb, можна виділити кілька ділянок S-подібної ВАХ (рис. 1):

– крива ВАХ на ділянці, обмежена інтервалом прикладеної напруги $0 \div U_{BO}$ (нижня гілка), відповідає високому опору (низькопровідний стан) матеріалу. Збільшення напруги мало впливає на струм, поки не буде досягнута напруга перемикавання (пробою) U_{BO} , при значенні струму I_L , який протікає при цьому через зразок (струм перемикавання);

– крива ВАХ на ділянці (позначена пунктиром), від значень U_{BO} і I_L до значень U_H і I_H , відповідає переключенню матеріалу з низькопровідного у високопровідний стан (нестійка область) ($I_L > I_H$). У процесі перемикавання у високопровідний стан незначне збільшення струму супроводжується швидким зменшенням напруги на зразку. Так як крива має S-подібну форму, то опір зразка негативний;

– крива ВАХ від значень U_H і I_H і вище відповідає високопровідному стану.

На рис. 1 показані ВАХ кристалів CdSb з різним вмістом легуючої домішки телуру. Як видно, збільшення концентрації легуючої домішки обумовлює ріст напруги перемикавання. Навпаки, підвищення температури середовища від $T = 78$ К різко зменшує

напругу перемикавання. Зростання прикладених напруг відбувається до значень, при яких джоулева теплота, що виділяється на зразках, стає достатньою для іонізації донорного рівня телуру $E_C = 0,12$ еВ. При цьому відбувається лавиноподібний перехід електронів у зону провідності, що приводить до стрибка струму [7].

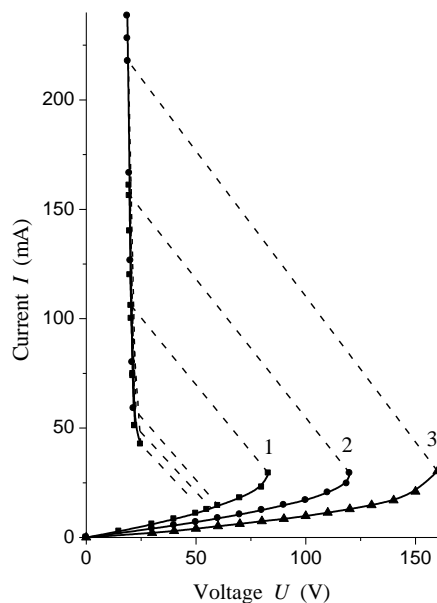


Рис. 1. Залежності струму від напруги $I = f(U)$ для кристалів $n\text{-CdSb}\langle\text{Te}\rangle$ ($T = 78$ K) при різних концентраціях домішки Te: 1 – 0,005 %; 2 – 0,05 %; 3 – 0,5 %

Із зростанням концентрації легуючої домішки (залежності 1-3 рис. 1), виявлено збільшення граничних величин прикладеної напруги електричного поля, що пов'язано [7] із різною іонізацією домішкового рівня телуру. Зростання концентрації домішки дозволяє досягнути необхідного для розігріву зразка значення струму при більших електричних полях.

Досліджено ВАХ кристалів антимоніду кадмію, легованих телуrom ($n\text{-CdSb}\langle\text{Te}\rangle$). Виявлено специфічні зміни ВАХ $n\text{-CdSb}$ з різним вмістом легуючої домішки. Із аналізу S-подібних ВАХ встановлено значення параметрів величин, які є важливими при розробці керованих сенсорних пристроїв напівпровідникової електроніки. Змінюючи вміст легуючої домішки у $n\text{-CdSb}\langle\text{Te}\rangle$, можна регулювати значення напруги вмикання U_{BO} . Цю важливу керуючу властивість демонструє його ВАХ, яка наведена на Рис. 1.

Список літератури

7. Давидюк Г.Є. Радіаційні ефекти в напівпровідниках : навч. посіб. Луцьк : Вежа-Друк, 2014. 278 с.
8. Доскоч В.П., Богданюк М.С., Божко В.В., Давидюк Г.Є., Федосов С.А. Вольтамперні характеристики антимоніду кадмію, опромінених швидкими нейтронами. *Матеріали XL наук. конф. проф.-виклад. складу і студ. ун-ту. Сер. фізична*, квіт. 1994 р., м. Луцьк, Україна. Луцьк : Волин. держ. ун-т ім. Лесі Українки, 1994. С. 15.
9. Manik O.N., Yerenko O.I. Solid Solutions of Cadmium and Zinc Antimonides. Chemical Bond (Review). *Physics and Chemistry of Solid State*. 2008. Vol. 9, № 3. P. 454–465.
10. Коваль Ю., Захарчук Д., Яшинський Л., Федосов С. Особливості ВАХ кристалів $n\text{-CdSb}$ при різних рівнях інтенсивності освітлення. *Materials and Technologies in Engineering (MTE-2024) : 2nd International Conference on Engineering, Materials, Technologies, Transport*, May 14–16, 2024, Lutsk, Ukraine : Conference program. Lutsk, 2024. P. 67.
11. Коваль Ю., Яшинський Л., Федосов С. Ефект перемикавання в кристалах CdSb, легованих Te. *Вісн. Львів. ун-ту. Сер. фізична*. 2006. № 39. С. 268–272.
12. Федосов А.В., Коваль Ю.В., Яшинський Л.В., Федосов С.А., Захарчук Д.А. Дослідження кінетичних ефектів в монокристалах антимоніду кадмію при різних фізико-активних впливах. *Нові технології*. 2008. № 2(20). С. 158–163.
13. Доскоч В.П., Панкевич З.В., Раренко И.М., Семенюк А.К., Федосов А.В. Температурно-электрическая неустойчивость в монокристаллах антимонида кадмия. *Изв. высш. учеб. завед. Физика*. 1989. № 4. С. 108–109.

ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СТЕКОЛ Ga₂S₃ - GeS₂ - Sb₂S₃ ЛЕГОВАНИХ Er³⁺ ТА Nd³⁺

Яцинюк Т.К., Аргюх В., Кевшин А.Г., Івашенко І.А., Галян В.В.

¹Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Воли 13, 43000, Луцьк, Україна;

²Факультет хімічної інженерії та технологій, Краківський університет технологій, вул. Варшавська 24, 31-155, Краків, Польща.

Сульфідні стекла леговані рідкісноземельними металами (РЗМ) завдяки своїм оптичним властивостям є перспективними матеріалами як активні та пасивні середовища в оптоелектронній техніці й телекомунікаціях.

Серед сульфідних систем найбільш дослідженими щодо структури, оптичних та люмінесцентних властивостей є стекла Ga₂S₃-GeS₂ леговані РЗМ. Вони відзначаються термічною стабільністю, високою прозорістю та ефективність випромінювання у видимому та близькому ІЧ діапазонах [1]. Недоліком цих стекел є схильність до кристалізації та нерівномірний розподіл РЗМ по склоутворюючій матриці, що може призводити до концентраційного гасіння ФЛ. Для зменшення впливу негативних чинників до складу матриці вводять додаткову компоненту Sb₂S₃ [2].

Ми дослідили спектри оптичного поглинання в діапазоні 600 – 2000 нм, проаналізували їх оптичну прозорість в інтервалі 700 – 7500 см⁻¹. Зафіксовано смуги поглинання, які відповідають переходам в f-оболонці іонів Er³⁺ та Nd³⁺. На основі досліджень раманівської спектроскопії встановлено структурні одиниці, на основі яких сформована склоутворююча матриця сплавів.

У ближньому та середньому ІЧ-діапазонах при збудженні лазером із довжиною хвилі 805 нм зареєстровано смуги фотолюмінесценції із максимумами 1070, 1350, 1540, 1700 та 2490 нм. На основі діаграми енергетичних рівнів іонів Er³⁺ і Nd³⁺ пояснено виникнення збуджених станів в іонах РЗМ і механізм випромінювання. Зміна інтенсивності смуг ФЛ зі збільшенням вмісту Er відбувається за рахунок існування двох конкуруючих каналів випромінювання та передачі енергії між іонами Er³⁺ та Nd³⁺.

Зареєстрована смуга ФЛ (максимум 2490 нм) у поєднанні з високим коефіцієнтом пропускання (~ 60-70%) створює хороші передумови для розробки оптико-електронних пристроїв, що працюють в середньому ІЧ-діапазоні на основі стекел системи Ga₂S₃ – GeS₂ – Sb₂S₃ легованих Er³⁺ та Nd³⁺. Підсилення смуги ФЛ із максимумом 2490 нм при додаванні співактиватора (Er³⁺) через механізм енергетичного трансферу є важливим чинником для створення світловипромінювальних середовищ для конструювання лазерних ножів у медицині, моніторингу забруднення атмосфери в екологічних дослідженнях високоточних далекомірів, що працюють в середньому інфрачервоному діапазоні.

Список використаних джерел

[1] V.V. Halyan, I.V. Kityk, A.H. Kevshyn, I.A. Ivashchenko, G. Lakshminarayana, M.V. Shevchuk, A. Fedorchuk, M. Piasecki, Effect of temperature on the structure and luminescence properties of Ag_{0.05}Ga_{0.05}Ge_{0.95}S₂-Er₂S₃ glasses, J. Lumin. 181 (2017) 315–320.

[2] M. Ichikawa, T. Wakasugi, K. Kadono. Glass formation, physico-chemical properties, and structure of glasses based on Ga₂S₃-GeS₂-Sb₂S₃ system. J. Non-Cryst. Solids 356 (2010) 2235–2240.

RELATIVISTIC GRAVITHERMODYNAMICS AND STATISTICAL INTERPRETATION OF QUANTUM MECHANICS

Danylchenko Pavlo

SSPE GeoSystem, pavlodanylchenko@gmail.com

Thermodynamical interpretation of General Relativity [1], consideration of the Universe as a single spiral-wave formation [2], and consideration of the so-called elementary particles and quarks as finite local flows of these spiral waves [3, 4] actually allowed the creation of a "theory of everything" [5], which would explain, in fact, everything in the world within the framework of a single model.

The presence of relativistic non-simultaneity (in cosmological time that is counted in the frame of references of spatial coordinates and time (FR) comoving with matter in expanding Universe (CFREU)) of events that are simultaneous in FR of people's world leads to the fact that Schwarzschild sphere belongs only to infinitely far cosmological future and the pseudo-horizon of events (that covers entire infinite in CFREU fundamental space) belongs only to infinitely far cosmological past [1, 6, 7].

For exactly this reason the collapse of the matter under the Schwarzschild sphere is fundamentally impossible, and the hypothetical "black holes" (that "substitute" real extremely massive neutron stars that have a hollow body topology and mirror symmetry of their own space and contain antimatter inside their inner singular surface) are also fundamentally impossible. And the theory of Big Bang of the Universe (that is based on its origination from a point) is false. After all the spherical surface that corresponds to infinitely far past of cosmological time has not zero, but, quite the contrary, maximum possible value of photometric radius in FR of people's world $r_c \approx c/H = (3/\Lambda)^{1/2}$, where: c – constant of velocity of light, H – Hubble constant, Λ – cosmological constant [1, 6].

Although the simultaneous spontaneous inversion of wave fronts of all microobjects of matter (and thus mutual transformation of matter into antimatter and of antimatter into matter when the Universe expansion in FR of people's world is changed to Universe self-contraction) is as it were fundamentally possible, the Universe self-contraction itself in FR of people's world is impossible. After all, this could have led to replacing evolution with degradation of all macroobjects of the Universe and eventually to the predominance of antihydrogen in it.

Relativistic invariance of thermodynamics [1, 6, 8] indicates the fundamental impossibility of slowing down of the rate of proper time of the matter that moves by inertia in surrounding gravitational field at any speed. So, the simple Lorentz transformations (and not the more general conform-Lorentz transformations) of the increments of spatial coordinates and time are not inherent in the motion of matter by inertia in the gravitational field. They are inherent only in the uniform motion of matter and, first of all, in the process of evolutionary self-contraction of its microobjects in CFREU. Exactly this indicates the falseness of the Etherington identity [1, 6, 9] and disproves both the acceleration of Universe expansion and the presence of dark energy in the Universe [1, 6, 10]. After all, the Hubble constant, as well as intrinsic value of velocity of light, is fundamentally invariable magnitude since it ensures the continuity of the spatial continuum in rigid FRs and, thus, also in FR of people's world. And that is why it can gradually change only in non-rigid FRs.

The solutions of equations of GR gravitational field in FR of people's world and in CFREU (taking into account evolutionary decreasing of the velocity of light in CFREU) also disprove the necessity of non-baryonic dark matter in the Universe [1, 6, 11, 12].

The discovered by Gibbs possibility in thermodynamics for gases to take with some probability the lots of microstates in one and the same macrostate is also inherent in any other matter. These microstates of matter change at the De Broglie frequency, and the values of instantaneous parameters and characteristics of the matter are being set by hidden parameters

[1, 6, 13]. And so any interaction of microobjects of matter can lead to the change of its microstate without the change of its equilibrium macrostate. So, all microobjects of matter form the collective spatiotemporal microstates, the change of which can be unpredictable due to unpredictability of interactions of microobjects of matter. And, therefore, the classical laws of statistical physics operate in nature, ensuring the predictability of only average statistical values of the parameters and characteristics of the matter. And this is applicable even to the motion of matter, which occurs in the process of changing its collective spatiotemporal microstates with the De Broglie frequency. That is, the motion of matter is also a manifestation of a gradual change in its collective spatiotemporal microstates.

In addition, the solutions of the equations of the gravitational field for a gradually cooling down matter are described in GR and in relativistic gravithermodynamics [1, 14] only by polynomials and show that it can move from the previous to the next quasi-equilibrium state only quantumly. After all, with each step of cooling down, the maximum indexes of the polynomials (corresponding to the energy of the entire set of synchronously cooling macroobjects of matter) decrease by only one unit. So, the gravitational fields of relativistic gravithermodynamics, which is only an improvement of the GR, do not need to be quantized at all. In it, as in thermodynamics, the collective quasi-equilibrium states of all interacting macroobjects of matter are already quantized.

All this allows us to consider quantum physics and quantum mechanics as a specific branch of statistical physics. Taking into account the discovered by Weisskopf [1, 6, 15, 16] fictitiousness of photons and neutrinos, it will be quite possible to provide a clear statistical interpretation of quantum mechanics and thereby create a "theory of everything" [5]. After all, the final steps in this direction have already been taken [17 – 20]:

«As students, Jussi Lindgren and Jukka Liukkonen had found one element of their quantum mechanics lectures unsatisfying. "When we were taught physics, there were some fundamental elements you were told were true, and you had to accept they were true without it being shown why," said Jussi Lindgren, "and I didn't really like this". Working as a hobby alongside their jobs in the Finnish government, and Lindgren's Ph.D. work in systems analysis at Aalto, the researchers devised a new method for expressing the laws of quantum mechanics using stochastic methods, a type of mathematics that deals with random chance and probability. The paper, published 27 December 2019 in *Scientific Reports* explores how stochastic methods can be used to derive a variety of equations in quantum mechanics from first principles, as opposed to having to build from ad hoc prior postulates. "The method will be useful for teachers or learners because it gives a better understanding of the reason why something is correct," said Jukka Liukkonen» [21].

List of references

- 1. Danylchenko, P.:** 2022, *Foundations of Relativistic Gravithermodynamics*. Vinnytsia: TVORY; 4rd online edition, Vinnytsia, https://pavlo-danylchenko.narod.ru/docs/Foundations_RGTD_Eng4.pdf; <https://elibrary.com.ua/pavlovin>, <https://elibrary.com.ua/m/articles/view/FOUNDATIONS-OF-RELATIVISTIC-GRAVITHERMODYNAMICS-4rd-edition>; https://chtyvo.org.ua/authors/Danylchenko_Pavlo/.
- 2. Danylchenko, P.:** 2014, Spiralwave model of the Universe. *Materials of all-Ukrainian seminar on theoretical and mathematical physics: in honour of 85th anniversary of Anatoli Swidzynski*, Lutsk Feb. 27 – Mar. 1, 2014: 21-26. <https://elibrary.com.ua/m/articles/download/11183/3410>, <http://pavlo-danylchenko.narod.ru/docs/spiralwaveuniverse.html> (in Russian).
- 3. Danylchenko, P.:** 2004, The spiral-wave nature of elementary particles. *Proceedings of International scientific conference "D.D. Ivanenko – outstanding physicist-theorist, pedagogue"*, Poltava Ukraine: ed. Rudenko O.P., 44-55. (in Russian) <http://www.sciteclibrary.ru/rus/catalog/pages/8276.html>.
- 4. Danylchenko, P.:** 2004, About possibilities of physical unrealizability of cosmological and gravitational singularities in General relativity. Gauge-evolutional interpretation of special and general relativities. Vinnytsia: Nova knyga, 2008: 45-95. http://pavlo-danylchenko.narod.ru/docs/Possibilities_Eng.html, https://pavlo-danylchenko.narod.ru/docs/Possibilities_Eng.pdf; <https://elibrary.com.ua/m/articles/download/11203/3411>. <https://elibrary.com.ua/m/articles/view/About-possibilities-of-physical-unrealizability-of-cosmological-and-gravitational-singularities-in-General-relativity>.

5. **Pultarova, T.:** 2022, The Theory of Everything: Searching for the universal rules of physics, <https://www.space.com/theory-of-everything-definition.html>.
6. **Danylchenko, P.:** 2020, Theoretical misconceptions and imaginary entities in astronomy, cosmology and physics. *Foundations and consequences of Relativistic Gravithermodynamics*. Vinnytsia: Nova knyga, 85-128. <http://pavlo-danylchenko.narod.ru/docs/FoundationRGTDUkr.pdf>, <https://elibrary.com.ua/m/articles/download/11192/3626>. 2022; 4rd online edition, Vinnytsia, <https://pavlo-danylchenko.narod.ru/docs/TheoreticalMisconceptions.pdf>; <https://elibrary.com.ua/pavlovin>; <https://elibrary.com.ua/m/articles/view/Theoretical-misconceptions-and-imaginary-entities-in-astronomy-cosmology-and-physics-4rd-online-edition>; https://chtyvo.org.ua/authors/Danylchenko_Pavlo/.
7. **Danylchenko, P.:** 2009, Global gravitational-optical gradient lens in expanding Universe. *Program and abstracts of the IV Gamov international conference in Odessa*, 17-23.08.2009, 20/1. http://pavlo-danylchenko.narod.ru/docs/GravitationalLense_Eng.htm; <https://elibrary.com.ua/m/articles/download/11185/3413>.
8. **Danylchenko, P.:** 2021, The condition of invariance of thermodynamic potentials and parameters with regard to the relativistic transformations. *Proceed. Fourth Int. Conference APFS'2021*. Lutsk: Volyn Univer. Press "Vezha", 37-40, <https://elibrary.com.ua/m/articles/download/11905/3767>.
9. **Danylchenko, P.:** 2021, ETHERINGTON'S PARALOGISM. *Proceed. Fourth Int. Conference "Actual Problems of Fundamental science" – APFS'2021*. (June 01 – 05, 2021, Lutsk, Ukraine). Lutsk: Volyn University Press "Vezha", 26-28, <https://elibrary.com.ua/m/articles/download/11893/3765>.
10. **Danylchenko, P.:** 2021, The evidence of absence of the accelerating expansion of the Universe. *Proceed. Fourth Int. Conference "Actual Problems of Fundamental science" – APFS'2021*. Lutsk: Volyn University Press "Vezha", 29-32, <https://elibrary.com.ua/m/articles/download/11906/3768>.
11. **Danylchenko, P.:** 2021, Solution of equations of the galaxy gravitational field. *Proceed. Fourth Int. Conference APFS'2021*. Lutsk: Volyn University Press "Vezha", 33-36. <https://elibrary.com.ua/m/articles/download/11907/3769>.
12. **Gupta, R.P.:** 2024, Testing CCC+TL Cosmology with Observed Baryon Acoustic Oscillation Features, <https://iopscience.iop.org/article/10.3847/1538-4357/ad1bc6>.
13. **Danylchenko, P.:** 2022, The instantaneous values of main thermodynamic parameters and potentials that are characteristic to Gibbs thermodynamic microstates. *Proceed. XI Int. Conference RNAOPM-2022*. Lutsk: Volyn Univer. Press "Vezha", 101-107, <http://pavlo-danylchenko.narod.ru/docs/danylchenko-thermodynamic-poster0.pdf>, <https://elibrary.com.ua/m/articles/download/12561/3872>.
14. **Danylchenko, P.:** 2022, The solutions of equations of gravitational field for quantum quasi-equilibrium cooling down gases. *Proceed. XI Int. Conference RNAOPM-2022*. Lutsk: Volyn Univer. Press "Vezha", 98-100, <http://pavlo-danylchenko.narod.ru/docs/danylchenko-quantum-poster0.pdf>, <https://elibrary.com.ua/m/articles/download/12560/3870>.
15. **Weisskopf, V.:** 1964, The place of elementary particle research in the development of modern physics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* Vol. 278, No. 1374, A Discussion on Recent European Contributions to the Development of the Physics of Elementary Particles (Apr. 7), 1964: 290-302. <http://cds.cern.ch/record/277434/files/p1.pdf?version=1>.
16. **Weisskopf, V.:** 1965, Quantum theory and elementary particles. *Invited talk delivered at the Washington Meeting of the American Physical Society*, 23 April, 1965. <https://cds.cern.ch/record/276339/files/p1.pdf>.
17. **Lindgren, I.:** 2009, Interpretation of Quantum Mechanics. A view of our universe. https://www.researchgate.net/publication/253546299_Interpretation_of_Quantum_Mechanics_A_view_of_our_universe.
18. **Rizzi, A.:** 2018, Does the PBR Theorem Rule out a Statistical Understanding of QM? https://www.researchgate.net/publication/329043561_Does_the_PBR_Theorem_Rule_out_a_Statistical_Understanding_of_QM
19. **Lindgren, J., Liukkonen, J.:** 2019, Quantum Mechanics can be understood through stochastic optimization on spacetimes, https://www.researchgate.net/publication/338189700_Quantum_Mechanics_can_be_understood_through_stochastic_optimization_on_spacetimes/link/5fb66c75a6fdcc6cc64a38ae/download.
20. **Lindgren, J., Liukkonen, J.:** 2020, The Heisenberg Uncertainty Principle as an Endogenous Equilibrium Property of Stochastic Optimal Control Systems in Quantum Mechanics, <https://www.mdpi.com/2073-8994/12/9/1533>.
21. **Aalto University:** Rewriting quantum mechanics in their spare time, <https://phys.org/news/2019-12-rewriting-quantum-mechanics.html>.

ІСТОРІЯ РОЗВИТКУ ЕЛЕКТРИКИ

А.Г. Кевшин¹, В.В. Галян², Н.А. Кевшин³, А.А. Семенюк⁴, І. П. Третяк

¹Доцент кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій Волинського національного університету імені Лесі Українки

²Завідувач кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій Волинського національного університету імені Лесі Українки, доктор фізико-математичних наук

³Студент 1-го курсу Волинського національного університету імені Лесі Українки

⁴Студент 2-го курсу Волинського національного університету імені Лесі Українки

Kevsyin_A@ukr.net, halyanv@ukr.net, Kevshyn.Nazar2023@vnu.edu.ua, Semenyuk_A@ukr.net

Історія розвитку електрики дуже цікава та важлива для розуміння сучасного світу. Зокрема, легендарний учений Фалес Мілетський, який жив у Стародавній Греції, згадував у своїх працях про таке явище, як електрика. Він з'ясував, що натертий хутром шматок бурштину притягує до себе різноманітні дрібні частинки [1]. Перша у світі знайдена батарейка відноситься до Древньої Парфії і знаходиться сьогодні в Іракському музеї, являє собою глиняний глечик із пробкою з асфальту. Такий пристрій дозволяв одержати напругу від 0,5-2 В.

Далі в історії людства триває проміжок часу без суттєвих згадок про електрику аж до 1600 року. Саму у цей час англійський лікар і фізик Вільям Гільберт проводить дослідження в галузі електрики. Він був одним з перших, хто вивчав явища електростатики і електродинаміки, зробив значний внесок у розвиток теорії електромагнетизму. Його роботи стали фундаментом для подальших досліджень в галузі фізики та інженерії.

У 1752 році Бенджамін Франклін провів відомий експеримент у Пенсильванії, США, із повітряним змієм. Цей експеримент відбувся в Пенсильванії, США. Франклін використав повітряний змій, щоб довести, що блискавка складається з електричних зарядів та зрозуміти її природу, зокрема, що блискавка і дрібні електричні іскри – це одне і те саме. Пізніше цей експеримент став основою для винаходу блискавковідводу.

В Італії наприкінці 18 ст. лікар Луїджі Гальвані препаруючи жабу випадково помітив, що м'язи жаби можуть скорочуватися від накопиченого на скальпелі електричного заряду. Вчений вважав, що людський організм сам генерує електрику, яке накопичується у м'язах, а потім розряджається. З цим не погоджувався фізик Алессандро Вольта, стверджуючи, що електрика має тільки неживе, металічне походження. Одним із його найвідоміших досягнень є створення першого електричного акумулятора, відомого як гальванічний елемент або елемент Вольты [2]. Вчений також вивчав явище електричного струму. Він створив пристрій, який складався з пари металевих електродів, занурених у рідину. Цей винахід виявився важливим кроком у напрямку розуміння електричних явищ. Відкриття Вольты поклало початок досліджень з гальванізації, що ведуть до розуміння хімічних процесів, що лежать в основі генерації електричного струму.

Джованні Вольта, племінник Алессандро Вольты, також був вченим, який вніс вагомий внесок у розвиток науки. Одним із його важливих внесків є дослідження електролітичного розкладання різних речовин за допомогою електричного струму. Джованні досліджував електроліз, процес розкладання різних речовин на складові частини за допомогою електричного струму. Ці дослідження дозволили розкрити багато важливих закономірностей у хімії, сприяли розвитку сучасної електрохімії та мали великий вплив на розвиток наукової думки в цій області.

У 19 ст. з електрикою проводилось багато різноманітних експериментів. У цей час з'являються перші дугові лампи, у яких для освітлення використовувалася електрична дуга. Сільський учитель Генрі Джозеф винайшов електричний телеграф, що мав великий вплив на розвиток телеграфного зв'язку. У 1830-х роках Джозеф почав досліджувати можливості передачі сигналів на відстань за допомогою електричного струму. Він винайшов просту, але ефективну систему електричного телеграфа, яка використовувала електричні сигнали для передачі повідомлень через дроти [3]. Ця система використовувала прості електричні схеми, які дозволяли передавати кодовані сигнали з одного кінця лінії до іншого. Генрі Джозеф поклав початок використанню електричних телеграфів для комерційних та громадських цілей, що відкрило шлях до масового розвитку телеграфного зв'язку та змінило спосіб, якими люди спілкувалися на відстані. Його винахід став важливим кроком у розвитку телекомунікаційної технології. Так Самуель Морзе – американський художник та винахідник, який став відомим завдяки своєму

винаходу – алфавітного коду, який він розробив для передачі повідомлень за допомогою цього електричного телеграфу. Цей алфавітний код став відомим як Морзе–код.

Важливий внесок у розвиток електрики вніс американець Томас Едісон. Він розробив першу промислову динамо-машину, яка була ключовим елементом у виробництві електричної енергії і першу централізовану систему електропостачання в Нью-Йорку. Едісон також працював над розвитком акумуляторів, що сприяло розвитку мобільних джерел електроенергії. Напевно, найвідоміший його винахід – це електрична лампа, яка стала базою для сучасної електричної лампи. Едісон усіляко намагався сприяти розвитку електрифікації, а створена ним компанія General Electric є електричним гігантом і на сьогодні. Саме у цю компанію прийшов у свій час працювати сербський винахідник та інженер Нікола Тесла. Але, пропрацювавши лише півроку, Тесла звільнився з компанії, оскільки йому не виплатили обіцяної винагороди за його відкриття. Найвидатнішим досягненням Тесли є винайдення системи передачі змінного струму [4]. Він розробив систему генерації, передачі та розподілу змінного струму, яка стала основою сучасної електроенергетики. Його система була конкурентною для системи постійного струму, розробленої Томасом Едісоном. Тесла також працював над системами змінного струму високої частоти, що відкрило шлях до розвитку бездротової передачі енергії та розвитку радіотехнологій. Трансформатор, який сконструював дослідник, дозволяв збільшувати або зменшувати напругу змінного струму, що було важливим кроком у розвитку електроенергетики та електроніки. Працюючи над концепцією бездротової передачі енергії, Тесла заклав основи розвитку радіо та безпроводних технологій. Його ідеї та винаходи стали основою для сучасних систем генерації, передачі та розподілу електроенергії, що використовуються в усьому світі.

У кінці XIX – початку XX століття відбувається «війна» між постійним і змінним струмом. Головними фігурами цієї «війни» були Томас Едісон, який був прибічником постійного струму (DC), і Нікола Тесла та Джордж Вестінгауз, які підтримували систему змінного струму (AC). Едісон був винахідником постійного струму і бачив його як стандарт для електрифікації міст. Його система постійного струму використовувалася для освітлення, вуличного освітлення та електропостачання у певних міських районах.

Тесла та Вестінгауз просували систему змінного струму, яка мала переваги у передачі електроенергії на великі відстані через використання трансформаторів для підвищення та зниження напруги. Це зробило змінний струм більш ефективним і економічним для розподілу енергії на великі відстані.

Кінцева перемога в цій «війні» була на боці змінного струму, особливо після успішного завершення проекту першої довготривалої системи змінного струму в Ніагарському водоспаді. Ця система змінного струму, розроблена Теслою та впроваджена компанією Westinghouse Electric, демонструвала переваги змінного струму в передачі електроенергії на великі відстані. У кінці кінців, система змінного струму стала домінуючою у світі електроенергетики, і більшість мереж електропостачання сьогодні використовують саме її.

Список використаних джерел

1. Кевшин А. Г. Історія фізики і техніки : конспект лекцій. 80 с. Луцьк, 2023. 80 с.
2. Кевшин А. Г. Фізика : конспект лекцій. Луцьк : ПП Іванюк В.П., 2016. 100 с.
3. Кевшин А. Г., Галан В. В. Фізика з основами радіоелектроніки: конспект лекцій. 113 с.
4. Винахідник, ідеї якого випереджали час (інтелектуальна біографія Ніколи Тесли (1856 - 1943 рр.)). К. : Парадигма пізнання: гуманітарні питання. 2016. № 3(14). С. 5-18.

ТЕОРЕТИЧНІ РОЗРАХУНКИ МОДЕЛІ КРИСТАЛІЧНИХ СТРУКТУР $Pb_{1-x}Cd_xTe$

Мазур Т.¹, Найдич Б.¹, Головата О.¹, Возняк О.¹, Івановський Ю.²,
Сахнюк П.², Замуруєва О.В.², Яворський Р.С.¹, Никируй Л.І.¹

¹Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, Івано-Франківськ, Україна;

²Волинський національний університет імені Лесі Українки, Луцьк, Україна;

e-mail: Zamuruyeva.Oksana@vnu.edu.ua

Телурид свинцю ($PbTe$) відомий як ефективний термоелектричний матеріал завдяки своїм відмінним властивостям, таким як високий коефіцієнт термоелектричного перетворення та стабільність при високих температурах [1-3]. Однак можливості впливу на його властивості є обмеженими, що знижує варіанти для їх покращення. Це створює потребу у пошуку нових методів та підходів для підвищення ефективності $PbTe$. Утворення потрійних сполук на основі бінарного $PbTe$ призводить до порушення кристалічної структури. Це спричиняє підвищення теплового опору, що, в свою чергу, покращує термоелектричні параметри. Сплав $CdTe$ [4] завдяки своїй зонній енергетичній структурі та можливості застосування як у термоелектричних, так і фотоелектричних пристроях, виглядає перспективним для впливу на ключові параметри телуриду свинцю у разі утворення твердого розчину. Потрійна сполука $Pb_{1-x}Cd_xTe$ ($x=0,01-0,11$), яка активно досліджується останніми роками [5], є популярним об'єктом досліджень. Відповідно, твердий розчин $Pb_{1-x}Cd_xTe$ ($x=0-0,1$) може проявляти як n-, так і p-тип провідності. Домінуючим точковим дефектом досліджуваної системи є електронейтральний дефект заміщення атомів Cd у позиціях Pb . Донорна дія кадмію в $PbTe$ може бути досить слабкою через ефективні процеси самокомпенсації. Ще одним аргументом на користь вивчення властивостей цього матеріалу є суттєво відмінні характеристики основних сполук. Зокрема, базова матриця $PbTe$ має а кристалічна структура кам'яної солі з постійною ґратки $a = 6,46 \text{ \AA}$ і шириною забороненої зони $0,16 \text{ eV}$ при 0 K [6]. $CdTe$ характеризується структурою суміші цинку з постійною ґратки $a = 6,48 \text{ \AA}$ [6] або $a = 6,478 \text{ \AA}$ і значенням забороненої зони $1,5 \text{ eV}$ [7].

З іншого боку, введення домішки Cd у базову матрицю телуриду свинцю збільшує ширину забороненої зони порівняно з $PbTe$, причому це збільшення зростає зі збільшенням вмісту Cd [8]. Це призводить до кількох важливих ефектів: покращення ефективної маси завдяки зміні структури енергетичних зон; значного зниження теплопровідності ґратки через упорядкування кристалічної структури та утворення мікро- та нанодфектів; зменшення біполярної теплопровідності завдяки збільшенню ширини забороненої зони. Розмір дефектів, що утворюються внаслідок введення окремого атома Cd або його композиції, визначає довжини хвиль фононів, які будуть розсіяні цими нерегулярностями кристалічної структури.

Дослідження зонної структури $Pb_{1-x}Cd_xTe$ ($x=0-0,1$) вказують на наявність зон легких і важких дірок. Валентні зони легких дірок у $PbTe$ та $Pb_{1-x}Cd_xTe$ $Pb_{1-x}Cd_xTe$ ($x=0-0,1$) можуть бути несферичними (через розташування мінімумів у точці L зони Бріллюена) та непараболічними (мала заборонена зона та сильна k -р взаємодія з провідністю смуги). Для аналізу механізмів розсіяння достатньо обмежитись однією сферичною енергетичною зоною з певною непараболічністю через кубічну структуру основної сполуки $NaCl$ $PbTe$ [8].

Ще більш цікавим є дослідження тонких плівок $Pb_{1-x}Cd_xTe$. Неоднорідності на межі розділу плівка-підкладка покращують термоелектричні властивості [5]. Численні зерна з'являються через наявність мікронапружень на межі розділу. Носії розкидані на межах цих зерен. Тонкоплівкова технологія дозволяє додатково модифікувати кінцеві

характеристики матеріалу. Різниця в значеннях температури підкладки і випарника викликає зміну швидкості осадження, що відповідає за рівновагу процесів осадження і зростання конденсату. Матеріал підкладки має кристалічну структуру, відмінну від матеріалу, який осаджується. Це призводить до появи внутрішніх мікронапружень. Додаткові термічні впливи регулюють розмір утворених зерен, тим самим визначаючи їх кількість, а отже, і кількість меж для розсіювання носіїв заряду або фононів.

Теоретичні розрахунки моделі кристалічних структур $Pb_{0,92}Cd_{0,08}Te$ реалізовано з двома кластерними моделями, вибраними вздовж площини (100). Кластери складаються з 24 атомів Телуру за своїми позиціями та 24 атомів Плюмбуму (рис.1, а) або 22 атомів Плюмбуму та 2 атомів Кадмію, які заміщають атоми Плюмбуму за своїми позиціями (рис. 1, б). В обох випадках було отримано природне зменшення значень постійної ґратки через обмежений розмір кластерів, що в той же час відповідає отриманій тонкій плівці $Pb_{0,9}Cd_{0,1}Te$.

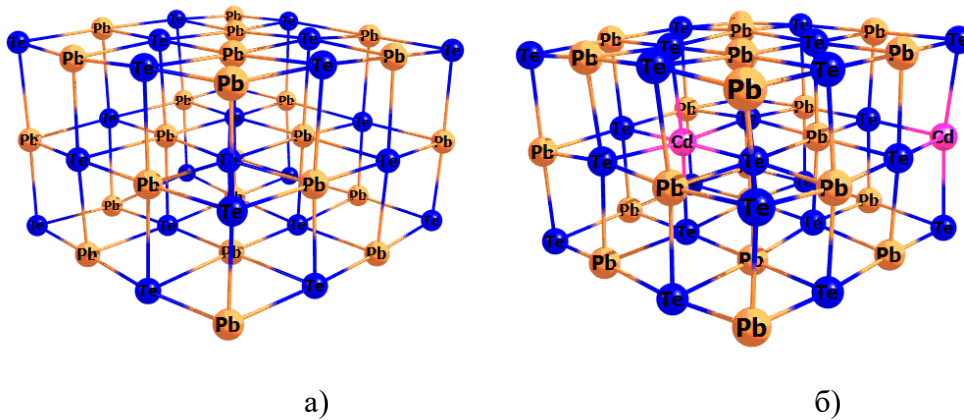


Рис. 1. $Pb_{24}Te_{24}$ (а) та $Pb_{22}Cd_2Te_{24}$ (б) для кристалографічного дослідження твердого розчину $Pb_{0,92}Cd_{0,08}Te$.

Розрахункові значення постійної ґратки: $a(Pb_{24}Te_{24}) = 0,6467$ нм, $a(Pb_{22}Cd_2Te_{24}) = 0,64244$ нм. Заміщення атома Pb атомом Cd і його зв'язування з Te призвело до зменшення постійної ґратки, що узгоджується з довідковими даними [5] на додаток до змін, викликаних плоскою формою моделі. Як показано в [9], для елементарної комірки PbTe заміщення атома Cd на поверхні викликає значні зміни найближчої прилеглої структури. Чим менший кристаліт, тим сильніші зміни відбуваються. Утворення зерен на поверхні тонкої плівки демонструє аналогічну поведінку, яка була спричинена граничними умовами та поверхневим натягом. Це також супроводжується зменшенням потенціальної енергії та посиленням зв'язку між атомами.

Список літератури

1. Lalonde D, Pei Y, Wang H and Snyder J 2011 *Materials Today* **14** 526
2. Tan G, Shi F, Hao S, Zhao LD, Chi H, Zhang X, Uher C, Wolverton C, Dravid VP and Kanatzidis M 2016 *Nature Communication* **7** 12167
3. Kostyuk O, Dzundza B, Yavorsky Y and Dashevsky Z 2021 *Physics and Chemistry of Solid State* **22** 45
4. Ilchuk H, Nykyruy L, Kashuba A, Semkiv I, Solovyov M, Naidych B, Kordan V, Deva L, Karkulovska M and Petrus R 2022 *Physics and Chemistry of Solid State* **23** 261
5. Minikayev R, Safari F, Katrusiak A, Szuszkiewicz W, Szczerbakow A, Bell A, ... & Paszkowicz W 2021 *Crystals* **11**(9), 1063
6. Saucedo E, Fornaro L, Corregidor V and Diéguez E 2004 *The European Physical Journal-Applied Physics* **27** 427
7. Prokopiv V, Mazur T, Slyotov M, Mazur M, Kinzerska O and Slyotov O 2020 *Physics and Chemistry of Solid State* **21** 52
8. Jaworski ChM, Nielsen MD, Wang H, Girard SN, Cai W, Porter WD, Kanatzidis MG and Heremans JP 2013 *Physical Review B* **87** 045203
9. Naidych BP and Kostyuk OB 2020 *Physics and Chemistry of Solid State* **21** 254

МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ ДЖОЗЕФСОНІВСЬКИХ КОНТАКТІВ З ДРУГОЮ ГАРМОНІКОЮ В СТРУМ-ФАЗОВІЙ ЗАЛЕЖНОСТІ

Сахнюк В. Є., Скорубський Д., Івановський Ю.В., Сахнюк П.В., Шава Д., Булік А. Е.

*Волинський національний університет імені Лесі Українки,
кафедра теоретичної та комп'ютерної фізики імені А.В. Свідзинського,
пр. Волі, 13, Луцьк, 43000, Україна
e-mail: Sakhnyuk.Vasyl@vnu.edu.ua*

У надпровідних контактах на основі високотемпературних надпровідників залежність струму від різниці фаз вважається ангармонічною [1]

$$j(\varphi) = j_{c0}(\sin\varphi + \alpha \sin 2\varphi), \quad (1)$$

де параметр ангармонічності α залежить від технології підготовки контакту. В загальному, ангармонічність струм-фазової залежності у надпровідних контактах на основі високотемпературних надпровідників та надпровідників на основі заліза пов'язана з d-хвильовою поведінкою параметра впорядкування та багатозонністю надпровідного стану в нових надпровідних сполуках [2].

Метою нашої роботи є дослідити вплив другої гармоніки на поведінку джозефсонівського контакту в магнітному полі та з'ясувати як наявність цієї гармоніки відобразиться на залежності критичного струму від величини потоку магнітного поля, яке пронизує надпровідний контакт. Отримані результати порівнюються з результатами інших теоретичних моделей.

Критичний струм контакту, при даній струм-фазовій залежності, досягається при різниці фаз

$$\cos\varphi_c = \frac{-1 + \sqrt{1 + 32\alpha^2}}{8\alpha}.$$

Тоді критичний струм контакту, як функція параметра α :

$$j_c(\alpha) = j_{c0} \frac{\sqrt{(\sqrt{1 + 32\alpha^2} + 1)^2 - 4}}{8\alpha} \left(1 + 2\alpha \frac{\sqrt{1 + 32\alpha^2} - 1}{8\alpha} \right). \quad (2)$$

Легко показати, що в асимптотичному випадку $\alpha \rightarrow 0$ одержуємо $j_c(0) = j_{c0}$, тобто j_{c0} – критичний струм контакту за відсутності другої гармоніки.

На Рис.1 побудовано графік, який відображає вплив параметра ангармонічності α в струм-фазовій залежності на критичний струм контакту. Як видно зі збільшенням α критичний струм зростає і досить швидко апроксимується лінійною залежністю. Те, що зі збільшенням α залежність критичного струму від параметра α наближається до лінійної можна також переконатися і безпосередньо на основі формули (2). Вважаючи $\alpha \gg 1$, одержимо $j_c(\alpha) \approx j_{c0}\alpha$.

Для залежності струму від різниці фаз та величини магнітного поля, що пронизує надпровідний контакт в роботі одержано наступну формулу

$$I(H, \varphi) = I_{c0} \left[\frac{\sin\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}\right)}{\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}} \cdot \sin\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0} + \varphi\right) + \alpha \frac{\sin\left(\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}\right)}{\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}} \cdot \sin\left(\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0} + 2\varphi\right) \right], \quad (3)$$

де використано позначення для повного потоку магнітного поля через контакт $\Phi = Hld$ та критичного струму за відсутності магнітного поля $I_{co} = j_{co}l1$ (l і d – довжина та товщина контакту, відповідно).

З одержаного результату (3) можемо зробити висновок, що критичний струм осцилює зі збільшенням магнітного полі, однак ці осциляції затухають і зрештою величина критичного струму прямує до нуля.

Для знаходження критичного струму контакту, як функції магнітного потоку необхідно обчислити від (3) похідну по ϕ . Далі, покладаючи одержану похідну рівною нулеві, знайти значення різниці фаз, при якому струм в контакті досягає максимуму.

В результаті одержимо залежність критичного струму контакту від магнітного потоку:

$$I_c(\Phi) = I_{co} \frac{3 + \sqrt{1 + 32\alpha^2 \cos^2\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}\right)}}{32\alpha \cos\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}\right)} \left[\left(\sqrt{1 + 32\alpha^2 \cos^2\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}\right)} + 1 \right)^2 - 4 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

Розглядаючи в останньому результаті асимптотичний випадок $\alpha \rightarrow 0$, що означатиме відкинути у виразі для струму доданок, пов'язаний з ангармонічністю, легко відтворюємо формулу залежності критичного струму від магнітного потоку для синусоїдної залежності струму від різниці фаз.

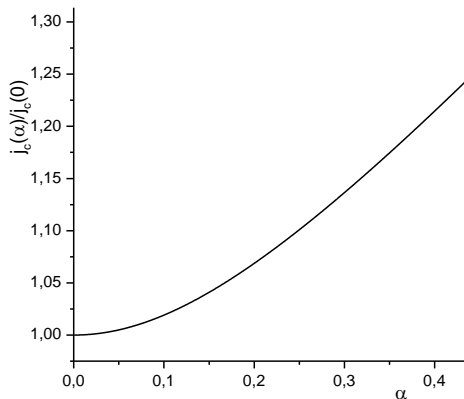


Рис. 1. Залежність густини критичного струму контакту від параметра α .

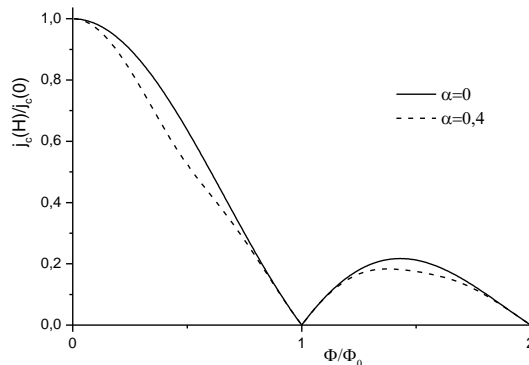


Рис.2. Критичний струм контакту, як функція магнітного потоку.

З графіка зображеного на Рис.2, можемо зробити висновок щодо впливу ангармонійності на залежність критичного струму контакту від магнітного потоку: зі збільшенням параметра α критичний струм є більш чутливим до появи зовнішнього магнітного поля. Особливо це добре видно в околі нуля: зі збільшенням магнітного потоку критичний струм швидше зменшується для випадку відмінного від нуля α . Ця обставина є корисною в плані практичного використання таких контактів у детекторах магнітних полів.

1. Tsuei, C.C., Kirtley, J.R. Pairing symmetry in cuprate superconductors. Review of Modern Physics. 2000. 72. P.969.
2. Askerzade, I. (2012). Unconventional Superconductors: anisotropy and multiband effects. Springer, Berlin, 177 p.

НАНО-СКВІДИ НА ОСНОВІ БАГАТОШАРОВИХ НАДПРОВІДНИХ КОНТАКТІВ

П. Шигорін, О. Новосад, О. Шигорін
Волинський національний університет імені Лесі Українки
просп. Воли 13, м. Луцьк, 43025, Україна
E-mail: shygorin.pavlo@vnu.edu.ua

В останні роки спостерігається тенденція до розвитку наномасштабного надпровідного квантового інтерференційного пристрою (нано-СКВІДу) з метою досягнення чутливості до магнітного потоку, достатньої для виявлення перевернутого одиночного електронного спіну атома [1,2]. Такі пристрої будуть мати широке застосування – від досліджень магнітних іонів та магнітних молекул або малих спінових популяцій у магнітних наночастках, до зчитування кубітів потоку та наномеханічних резонаторів.

Стандартна технологія виготовлення нано-СКВІДів полягає у зменшенні як розміру пари джозефсонівських тунельних контактів, так і надпровідної петлі, що з'єднує два контакти (Рис.1).

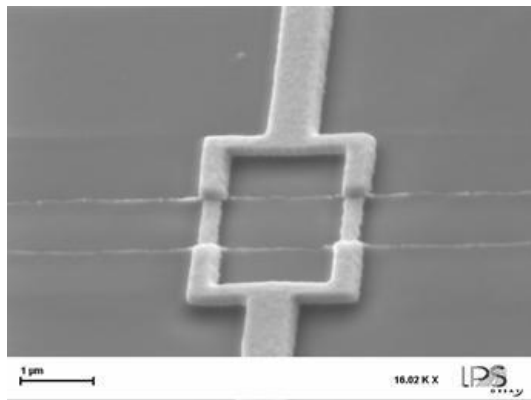


Рис. 1. Вимірвальна частина СКВІДу порядку кількох мікрометрів (Groupe Physique Mesoscopique, LPS, Orsay).

Очевидно, що таку геометрію важко зменшити до розмірів порядку нанометрів. Тому виникає необхідність у розробці пристрою, який легко масштабується, і має СКВІД-подібні властивості. Зрозумілим є також те, що такий пристрій повинен базуватися на нових фізичних принципах роботи.

У нещодавній роботі [3] Невірковець та Муханов, експериментально досліджуючи поведінку в магнітному полі багат шарового надпровідного контакту ферромагнетик–нормальний метал, спостерігали синусоїдальну поведінку критичного струму. Одержані у роботі осциляції критичного струму нагадують ті, що відбуваються у надпровідних квантових інтерференційних пристроях. На Рис. 2 показано схематичну будову контакту та реальний переріз контакту.

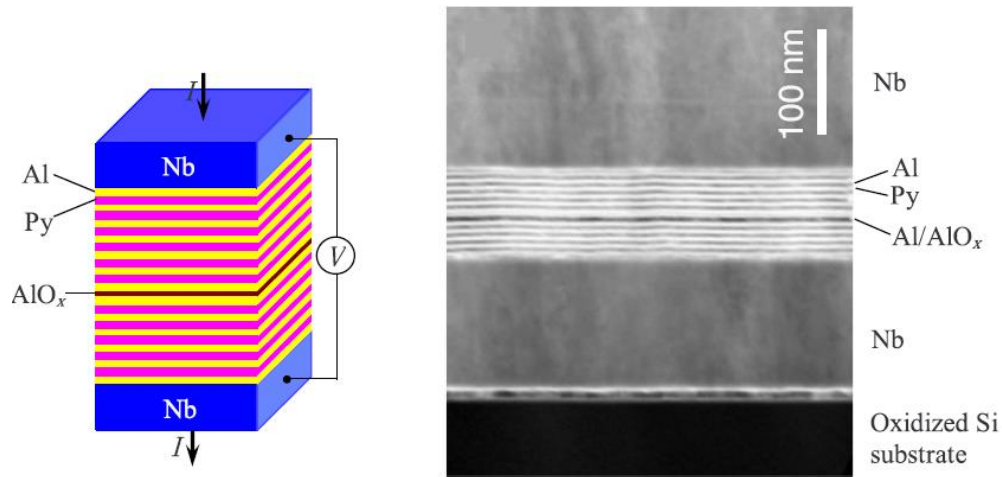


Рис.2 Схематична будова багатошарового контакту ферромагнетик-нормальний метал та його реальний переріз у масштабі 100 нм (І.Р. Nevirkovets and О.А. Mukhanov, *Supercond. Sci. Tech.* 31, 03LT01 (2018)).

Відзначимо, що оскільки джозефсонівські коливання відбуваються у з'єднаннях без будь-якої надпровідної петлі, тому дана технологія підходить для мініатюризації на наномасштаб [4]. Ми переконані, що подальше дослідження такого типу контактів дозволить створити ефективні нано-СКВІДи.

У роботі проведено теоретичні дослідження джозефсонівського струму у багатошаровому SNFIFNS надпровідному контакті. На основі мікроскопічних рівнянь теорії надпровідності було досліджено залежність критичного струму через контакт від магнітного потоку, яка дається виразом

$$I_c(B) = \int_{-\infty}^{\infty} j(y) \exp\left(\frac{2\pi i B t}{\Phi_0} y\right) dy.$$

Тут B – індукція магнітного поля, Φ_0 – квант магнітного потоку.

Також була розрахована ефективна магнітна товщина контакту. Вона визначається виразом

$$t = \mu d + 2\lambda_L,$$

де λ_L – лондонівська глибина проникнення, d – товщина надпровідного електрода.

Одержані співвідношення дають теоретичне підґрунтя для побудови датчиків магнітного поля на основі багатошарових надпровідних контактів на основі переходу ферромагнетик-нормальний метал.

- [1] M. J. Martínez-Pérez and D. Koelle, *Phys. Sci. Rev.* 2(8), 20175001 (2017).
- [2] C. Granata and A. Vettoliere, *Physics Reports* 614, 1 (2016).
- [3] I.P. Nevirkovets and O.A. Mukhanov, *Supercond. Sci. Tech.* 31, 03LT01 (2018).
- [4] M. Belogolovskii and I. Nevirkovets. 2024, PREPRINT
<https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-3809379>

ДИСПЕРСІЯ ЗВУКОВИХ ХВИЛЬ У ПРОСТОРОВО-ОДНОРІДНОМУ КОНДЕНСОВАНОМУ БОЗЕ-ГАЗІ

П. Шигорін, А. Приходько

Волинський національний університет імені Лесі Українки

просп. Воли 13, м. Луцьк, 43025, Україна

E-mail: shygorin.pavlo@vnu.edu.ua

Основним інструментом опису нерівноважних процесів у розріджених газах є кінетичні рівняння. У випадку класичних газів — це кінетичне рівняння Больцмана. При описі квантових систем тотожних частинок використовують рівняння Улінга — Уленбека, яке є квазікласичним розширенням рівняння Больцмана. Значно складнішим є опис квантових систем із спонтанно порушеною симетрією, до яких відносяться розріджені гази атомів Бозе нижче температури Бозе-Айнштайнівської конденсації. Додаткові труднощі опису таких систем пов'язані із наявністю Бозе-Айнштайнівського конденсату. Відповідна система рівнянь динаміки конденсованого бозе-газу складається із кінетичного рівняння типу Улінга — Уленбека для атомів надконденсату та рівняння Гросса — Пітаєвського, яке описує еволюцію хвильової функції конденсатних атомів [1].

Ця робота присвячена теоретичному опису процесу поширення звукових хвиль у розріджених газах атомів Бозе за наявності Бозе-Айнштайнівського конденсату. Оскільки у процесі поширення звукової хвилі відбуваються незначні відхилення від стану локальної термодинамічної рівноваги, відповідний опис можна проводити на рівні лінеаризованих кінетичних рівнянь.

У нашій роботі побудоване рівняння, яке описує слабо-нерівноважні процеси в розрідженому бозе-газі за наявності конденсату. Воно поєднує лінеаризоване кінетичне рівняння та рівняння Гросса — Пітаєвського. Одержане рівняння було застосоване до опису звукових хвиль у розглядуваній системі. Зокрема було одержане і досліджене дисперсійне співвідношення між частотою та хвильовим числом звукової хвилі. Одержано температурну залежність в'язкості газу. Проаналізовано вплив в'язкості на згасання звуків.

Лінеаризоване кінетичне рівняння для надконденсатної теплової хмарини має вигляд

$$i(1 + f_0)(c_z k [h_0(\vec{c}) + 2A\delta\tilde{n}_0(\vec{c})] - \omega_0 h_0(\vec{c})) = L_{22}[h_0(\vec{c})], \quad A = \frac{\beta g \frac{\omega_0^2}{k^2} + \frac{\beta^2 g^2 n_{c0}}{2}}{\frac{\omega_0^2}{k^2} - \frac{\beta g n_{c0}}{2}}.$$

$$L_{22}[h] = \frac{g^2 m^2}{2\sqrt{2}\pi^5 \hbar^7} \left(\frac{m}{\beta}\right)^{3/2} \int d\vec{c}_2 \int d\vec{c}_3 \int d\vec{c}_4 \delta(\vec{c} + \vec{c}_2 - \vec{c}_3 - \vec{c}_4) \delta(c^2 + c_2^2 - c_3^2 - c_4^2) \\ \times f_{02}(1 + f_{03})(1 + f_{04})[h_4 + h_3 - h_2 - h]$$

$\vec{c} = (\beta/2m)^{1/2} \vec{p}$ — безрозмірна швидкість, ω_0 — частота звукової хвилі, k — хвильове число, $\beta = 1/k_B T$.

Для їх відшукування розкладемо лінеаризований інтеграл зіткнень $L_{22}[h]$ за власними функціями ψ_i та власними значеннями λ_i

$$L_{22}[\psi_i] = \lambda_i \psi_i,$$

Тоді отримуємо розклад для $h_0(\vec{c})$

$$h_0(\vec{c}) = \sum_l a_l \psi_l(\vec{c}).$$

Підстановка розкладу за власними функціями у кінетичне рівняння приводить до дисперсійного співвідношення

$$\|ik(M_{ml} + 2AN_{ml}) + \lambda_l Q_{ml} - i\omega_0 \delta_{ml}\| = 0.$$

В розгорнутому вигляді дане співвідношення має вигляд

$$\Delta_4 = \begin{vmatrix} -\omega_0 & kM_{12} & 0 & 0 \\ kM_{12} + 2AkN_{21} & -\omega_0 & kM_{23} & kM_{24} \\ 0 & kM_{23} & -\omega_0 & 0 \\ 0 & kM_{24} & 0 & -\omega_0 - i\lambda_4 Q_{44} \end{vmatrix}$$

$$= i\omega^5 \eta \frac{\beta \Lambda^3}{g_{7/2}(z_0)} - \omega^4 - i\omega^3 k^2 \eta \frac{\beta \Lambda^3}{g_{7/2}(z_0)} \left(\frac{9}{5} v_0^2 + \beta g \tilde{n}_0 + \frac{\beta g n_{c0}}{2} \right)$$

$$+ \omega^2 k^2 \left(v_0^2 + \beta g \tilde{n}_0 + \frac{\beta g n_{c0}}{2} \right) + i\omega k^4 \eta \frac{\beta \Lambda^3}{g_{7/2}(z_0)} \frac{\beta g n_{c0}}{2} \left(\frac{9}{5} v_0^2 - \beta g \tilde{n}_0 \right)$$

$$- k^4 \frac{\beta g n_{c0}}{2} (v_0^2 - \beta g \tilde{n}_0) = 0.$$

Одержані вирази приводять до наступних залежностей для швидкостей першого та другого звуків від температури при різних частотах

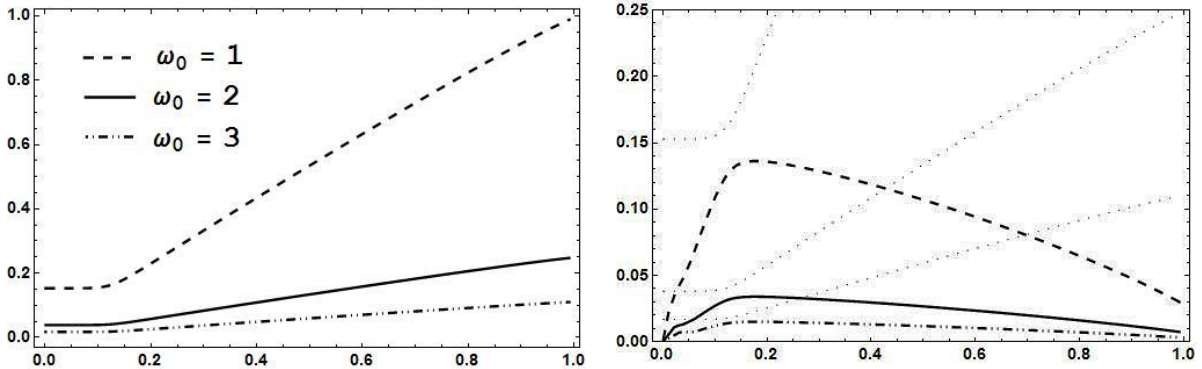


Рис. 1. Квадрати швидкостей першого

(ліворуч) і другого (праворуч) звуків (нормовані до швидкості першого звуку u_0 при $T = T_c$) для різних частотах. $gn = 0.2k_B T_c$. Довжина розсіяння для ^{23}Na : $a = 2.75$ нм.

Як і очікувалось, перший і другий звук гібридизуються при низьких температурах. Це вперше було обговорено в роботі Лі і Янга, присвяченій колективним модам в однорідному бозе-газі [2]. За дуже низьких температур, коли \tilde{n}_0 змінюється фізичний зміст цих двох мод в результаті гібридизації. Перший звук має скінченну швидкість при прямуванні температури до нуля. Таким чином, в низькотемпературній області перший звук — це коливання густини конденсату. Вище температури гібридизації перший звук відповідає коливанням густини теплової хмарини, другий звук — це в основному коливання густини конденсату.

[1] I. Dmytruk; A. Svidzynskiy; P. Shygorin, *Low Temp. Phys.* 43, 683–688 (2017).

[2] T.D. Lee, C.N. Yang, *Phys. Rev.*, 113 – 1406 (1959).

КВАНТОВЕ ТУНЕЛЮВАННЯ В МАГНІТНОМУ ПОЛІ

П. Шигорін, Д. Скорубський

Волинський національний університет імені Лесі Українки

просп. Воли 13, м. Луцьк, 43025, Україна

E-mail: shygorin.pavlo@vnu.edu.ua

Робота присвячена теоретичному дослідженню квантового тунелювання електронів крізь подвійний δ – функційний бар’єр в магнітному полі. Актуальність такого дослідження пов’язана з тим, що такого типу бар’єр описує тунельний шаруватий контакт типу SISIS або SINIS. В таких тунельних контактах виникають джозефсонівські струмові стани [1]. Критичний струм у контактах є залежним від прозорості потенціального бар’єру. У даній роботі ми досліджуємо вплив магнітного поля на прозорість потенціального бар’єра.

У нашій моделі оператор Гамільтона зарядженої частинки в електромагнітному полі має вигляд:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi,$$

де φ - скалярний потенціал, $\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{H} \vec{r}]$ – вектор-потенціал, $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор імпульсу.

Рівняння Шредінгера в області:

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c} y \right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \right] \psi = E\psi.$$

Розв’язки: $\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(xp_x + zp_z)} \chi(y)$.

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} a_H^{\frac{1}{2}} \sqrt{2^n n!}} \exp \left[-\frac{(y - y_0)^2}{2a_H^2} \right] H_n \left(\frac{y - y_0}{a_H} \right)$$

Зшивка розв’язків у трьох областях дає результат

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \psi_2(a) = \psi_3(a) \\ \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=0} - \frac{d\psi_1}{dx} \Big|_{x=0} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi_1(0) \\ \frac{d\psi_3}{dx} \Big|_{x=a} - \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=a} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi_1(a) \end{cases}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A + 1 = [B + C]\chi(0), \\ [Be^{\frac{i}{\hbar}ap} + Ce^{-\frac{i}{\hbar}ap}]\chi(0) = De^{ika}, \\ \frac{i}{\hbar}p\chi(0)[B - C] + ikA - ik = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + 1), \\ ikDe^{ika} - \frac{i}{\hbar}p\chi(0)[Be^{\frac{i}{\hbar}ap} - Ce^{-\frac{i}{\hbar}ap}] = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}De^{ika}. \end{array} \right.$$

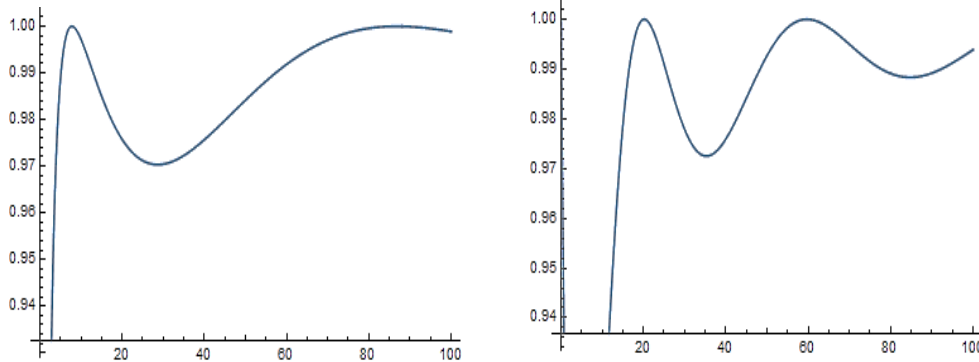
Звідси ми знаходимо вираз для коефіцієнта прозорості потенціального бар'єру, який має вигляд

$$T = |D|^2 = DD^* = \frac{4k^4}{\beta^2(\beta \sin ka - 2 \cos ka k)^2 + 4k^4}$$

Також маємо умову резонансу

$$\beta \sin ka - 2 \cos ka k = 0$$

Графічні залежності коефіцієнта проходження від відносної енергії налітаючих електронів за відсутності магнітного поля (рисунок ліворуч) та за його наявності (рисунок праворуч) наведені внизу



Бачимо, що при увімкненні магнітного поля резонансний максимум зміщується, а також з'являється додатковий резонансний максимум. Таким чином, у результаті маємо чутливість тунельного контакту до магнітного поля, що може бути використане для створення магніточутливого сенсора.

[1] P. Shygorin, B. Venhryn, *Journal Of Physical Studies*, v. 24, No. 4, 4706-4711 (2020).

СИНГУЛЯРНЕ ІНТЕГРАЛЬНЕ РІВНЯННЯ В ОДНОВИМІРНІЙ ЗАДАЧІ КУЛОНА

Шутовський А.М., Сахнюк В.Є., Муляр В.П.

Кафедра теоретичної та комп'ютерної фізики імені А. В. Свідзинського,
Кафедра експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій,
Волинський національний університет імені Лесі Українки
Shutovskyi.Arsen@vnu.edu.ua, sh93ar@gmail.com

Теоретична фізика поділяється на багато розділів, характерною особливістю кожного з яких є наявність диференціального рівняння певного типу, що використовується з метою опису розглядуваної системи. У класичній механіці відповідними диференціальними рівняннями є рівняння Ньютона, рівняння Лагранжа, рівняння Гамільтона тощо. Невід'ємною рисою електродинаміки є добре відомі рівняння Максвелла. А що стосується нерелятивістської квантової механіки [1], то тут у центрі уваги вже перебуває так зване рівняння Шредінгера.

У декартовій системі координат рівняння Шредінгера є лінійним диференціальним рівнянням другого порядку. Варто наголосити на тому, що рівняння Шредінгера також може мати вигляд інтегрального рівняння, яке одержується після застосування перетворень Фур'є до рівняння Шредінгера в декартових координатах. Дане інтегральне рівняння, яке називається рівнянням Шредінгера в імпульсному представленні, виникає при розв'язуванні широкого спектру задач. Однією із таких задач є одновимірна задача Кулона.

В даному дослідженні представлено нове бачення одновимірної задачі Кулона [2]. Показано, що застосування перетворень Фур'є дає змогу перейти від диференціального рівняння Шредінгера другого порядку з Кулонівським потенціалом до інтегрального рівняння у просторі імпульсів, яке має інтегральне ядро у вигляді деякої логарифмічної функції. Оскільки дана логарифмічна функція має особливість у певній точці імпульсного простору, то побудоване в роботі інтегральне рівняння є сингулярним.

Якщо говорити про класифікацію інтегральних рівнянь, то сингулярне рівняння є однорідним інтегральним рівнянням Фредгольма другого роду. З'ясувалося, що якщо підставити сингулярне інтегральне рівняння у те саме сингулярне інтегральне рівняння, то вдається отримати рівняння Фредгольма другого роду з іншим інтегральним ядром. Застосування цілої низки параметризацій дозволяє перетворити нове інтегральне ядро та отримати лінійне інтегральне рівняння Вольтерра другого роду. Оскільки інтегральне рівняння такого типу можна звести до диференціального рівняння, то всі подальші розрахунки не містять особливих труднощів. З метою повернення до хвильової функції в конфігураційному представленні довелося врахувати хіба що правило інтегрування з дельта-функцією Дірака [3].

1. Вакарчук І.О. Квантова механіка. 4 вид. Львів: ЛНУ ім. Івана Франка, 2012. 872 с.
2. Shutovskyi A., Sakhnyuk V. and Muliar V. Solving a singular integral equation for the one-dimensional Coulomb problem // *Physica Scripta* 2023. Vol. 98, no. 8. P. 085219.
3. Boas M.L. *Mathematical Methods in The Physical Sciences*. 3rd ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, Inc., 2006. 859 p.

COMPUTER SIMULATION OF THE THERMAL MODEL WITH CONVECTION OF THE UPPER MANTLE OF THE EARTH

V. Fourman

Department of Mineral Geology and Geophysics, Ivan Franko National University of Lviv,
Hrushevskij Str. 4,
UA – 79005, Lviv, Ukraine e-mail: fourman@i.ua

Abstract— The dependence of the thermal state of the mantle on possible temperature variations is described and a thermal model of the Earth's upper mantle for computer simulation is constructed. It is noted that the determination of mantle temperatures from the observed heat flux data contains an uncertainty factor associated with the difficulty of determining the contribution of the crust based on the results of the interpretation of the observed heat flux. A connection between the intensity of convective heat transfer processes in the upper mantle and the heat flux in the Earth's crust has been revealed.

Keywords — computer modeling, convection; upper mantle; thermal model; temperature variations.

The mantle is not yet available for direct study, but considerable information has already been accumulated about it based on the use of various indirect research methods. The influence of the mantle on the Earth's surface is quite diverse. Modern data show that the structure of the upper mantle of the continents is crucial for the evolution of the Earth. Previously, it was assumed that continents are passive formations that simply follow mantle flows, the structure and evolution of which does not explicitly depend on the structure and properties of the continental lithosphere. The comparison and identification of processes occurring inside the Earth and a mere thermal machine has certain limitations. The intensity of heating in the Earth far exceeds the natural capabilities of heat exchange within a liquid by heat conduction, resulting in convection flows.

In the case of the Earth, if there were no heating of the substance from the inside, it would remain to consider heat exchange processes as the process of cooling of the planet from the outside. In this case, convection flows could arise due to the uneven cooling of the Earth's surface. However, heat transfer depends on the temperature gradient, and cooling occurs faster where the gradient is greater. That is, a localized higher temperature gradient (which arises in an unclear way) in natural conditions must necessarily decrease. The system, according to the laws of thermodynamics, should strive for thermodynamic equilibrium. Thus, reliable energy sources are needed for the emergence and divergence of gradients. Therefore, we need to look for them, and not only for convection flows; they are needed for the horizontal movement of lithospheric plates, in fact, for the movement of continents. Where are the energy sources for these movements?

Heat transfer and convective processes in the mantle. What are the reasons for high temperatures in the Earth's interior? Discussions on this topic have been going on for many years. According to one of the most common hypotheses, the source of heat in the interior of the planet is radioactive elements in its core, and the main coolant is deep fluids, especially those characteristic of the outer core. It is clear that it will take many more years before additional data are accumulated and theoretical hypotheses are improved, and we will be able

to get a clearer picture of the structure and dynamic properties of the mantle. Convection models have been proposed to explain how processes occurring in the mantle can move the layers of the lithosphere. Convection means that warm matter rises up and cold matter sinks down. Various hypotheses about the possible mechanism of this process [1-6] assume large convection circuits covering the entire thickness of the mantle. An alternative scheme is based on the argument that heat absorption during phase transitions can limit the convection region to the surface layers of the mantle. In yet another model, the convective region is limited to the asthenosphere, i.e., the mantle layer that extends at a depth of 100 to 300 km. At the same time, the zones where the lithosphere can “sink” into the mantle and thus participate in convection cover depths of up to 700 km. Finally, there is another model that assumes that the convection mechanism is the formation of thermal “pillars” inside the mantle. The main heat sources in the Earth's mantle are the heat reserves left over from the early molten state and the heat generated by the decay of radioactive elements. The average content of radioactive elements in the Earth's crust does not exceed thousandths of a gram per kilogram of rock, but the heat flux generated by them affects the thermal properties of the Earth as a whole [2, 5].

Table 1 - Thermophysical constants of the Earth

total heat flux, Q_{\oplus}	$4.4 \cdot 10^{13}$ Вт;
specific mass isobaric heat capacity, C_p , upper mantle	1250 Дж/кг·К;
specific mass isobaric heat capacity, C_p , lower mantle	1260 Дж/кг·К;
thermal conductivity, k_r , upper mantle	5 Вт/м·К;
thermal conductivity, k_r , lower mantle	10 Вт/м·К.

The heat reserve of the Earth's interior can be judged by the temperature distribution. The most reliable is the determination of temperatures based on the melting points of the deep interior. Modern technology is not yet able to directly model the relevant conditions by extrapolating the results of experiments using shock waves. Therefore, the discrepancy between models of temperature field distribution is within one to two thousand degrees. Among these models, the highest melting point – 8 240 K° in the center of the Earth was given by O. Williamson et al. [7, 8], and R. Buchler [9] gives the lowest temperature – 5 150 K°. The calculated values of melting temperatures are taken slightly lower due to the presence of a light component, and the deviation can range from 500 to 1,000 K° [2]. At the same time, there are well-known and understandable modern values of thermophysical quantities. The thermal state of the Earth is significantly influenced by the heat flux from its surface, which is determined quite confidently [2]. The equally important heat flow from the core to the mantle is largely determined by convective processes occurring in the Earth's core and mantle, the intensity of which, respectively, affects the magnetic field generated in it. Differences in the estimation of this heat flux from the Earth's core are in the range of $(0,3 - 2) \cdot 10^{13}$ Вт, as noted in [4]. In [2, 10-13], self-consistent models of the thermal state of a spherically symmetric Earth were constructed, based on models of melting points and dependencies between dimensionless thermodynamic and thermophysical parameters. The disadvantage of such works is the use of parameters that have little to do with the conditions in the deep interior of the Earth. In other

works [14-18], the direct problem of effective heat transfer was modeled, and the distribution of both radioactive sources and effective thermal conductivity was given. Today, this approach has been developed in works devoted to numerical computer modeling of thermal convection in the Earth's mantle [19-24]. However, in such works, the spherically symmetric heat transfer in the mantle is factually. Our goal is to determine a fully self-consistent long-term (for hours to several hundred million years) model of spherically symmetric heat transfer in the mantle, based on [15]. The expected result of the modeling is the physical dependence of heat transfer on a small number of parameters that can be estimated and refined independently. The model is based on the values of the phase transition temperatures between the Earth's shells and the heat flux from its surface. As a result, the relationship between the intensity of convective heat transfer processes in the mantle, the value of the heat flux from the Earth's core, and the average content of radioactive heat sources in the Earth's crust was reliably estimated.

So, the mathematical problem is reduced to the following. We have three unknown coordinate and time functions for mantle convection: the velocity vector of mantle currents $V_i(x, y, z, t)$, the temperature distribution $T(x, y, z, t)$, and the pressure distribution $p(x, y, z, t)$, and four unknown time functions for the motion of the continents as a whole: two components of the instantaneous translational velocity of the center of gravity $u_0(t)$ and $v_0(t)$, one component of the instantaneous angular velocity of the continent's rotation around the center of gravity $\omega(t)$, and the temperature distribution in the continent $T_c(x, y, z, t)$. To calculate them, there is a system of interdependent equations: three differential convection equations, three integral relations, to which the Euler equations are reduced, and the equation of heat transfer in the continent. Knowing the position and velocities of the continent $u_0(t)$, $v_0(t)$ and $\omega(t)$ at a given moment, one can find its position at the next moment τ . The boundary conditions are used to determine the steady-state integrations of the differential equations. The temperature distributions $T(x, y, z, t)$ found in this way from the solutions of the above equations allow us to find the connection between the processes of mantle heat convection and the heat flux from the Earth's upper mantle, if we follow the considerations of the approximation of spherically symmetric heat transfer of the Earth's mantle [6]. To model the processes of mantle thermal convection and its interaction with the heat flow from the Earth's upper mantle in the approximation of spherically symmetric heat transfer of the Earth's mantle as a solution to systems of nonlinear equations, the authors of [6] developed a program that obtained physically significant results for the Earth, shown in Fig. 1.

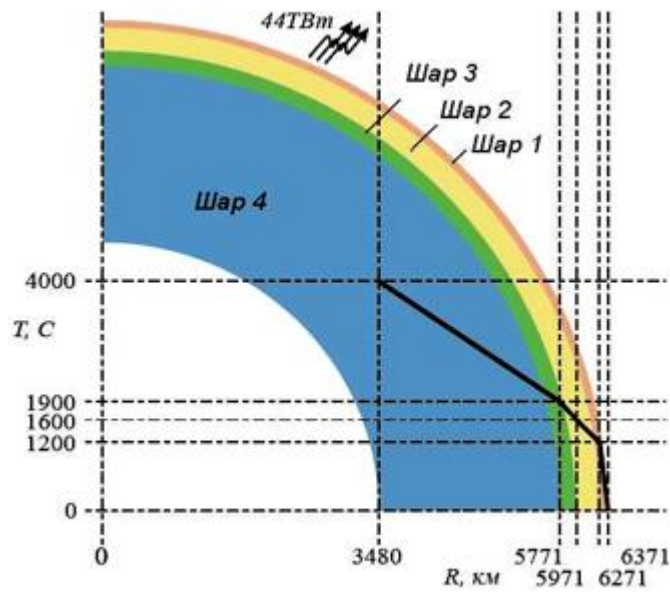


Fig. 1. Model of heat transfer in the Earth's upper mantle in the four- to three-layer approximation. (The constant radioactive values for (7) from [1] are as follows: $Q_{\oplus} = 44 \cdot 10^{12} \text{ BT} = 44 \text{ TB}_T$; $q_0 = 4,722375 \cdot 10^{-9}$; $q_1 = -2,680118 \cdot 10^{-26}$)

Similarly to [2], the area from the core-mantle boundary to the surface was divided into four spherical layers. The PREM (Preliminary Reference Earth Model) was used to determine the average values of the layer densities. Phase transition temperatures (see table) and data on heat flow from the Earth's surface Q_{\oplus} taken from [1]. Thus, the method of constructing a simple self-consistent thermal model of the Earth's mantle and its convection is an independent method for determining the temperature and heat flux distribution in the Earth's upper mantle. The study of the structure of the mantle density distribution is crucial for understanding the Earth's evolution, because it is the density differentiation in the mantle associated with variations in both temperature and chemical composition that drives mantle convection. Yet, all the available information we currently have is insufficient to fully understand the nature of thermodynamic and convective processes occurring in the mantle, although they are key to explaining many geophysical and geological phenomena. We analyze the possibilities of constructing a simple self-consistent thermal model of the Earth's mantle and its convection based only on reliably known data as evidence of the dependence of the thermal state of the mantle on possible temperature variations at the core-mantle boundary. The results of this work make it possible to obtain functional dependencies for the temperature and heat flux distributions in the Earth's interior, to calculate them, and to project the evolution of phase transitions depending on the temperature of phase transitions, concentrations of radioactive sources, and thermal conductivity characteristics of the upper solid part of the mantle and crust.

References

[1] Takesi Yukutake. The inner core and the surface heat flow as clues to estimating the initial temperature of the Earth's core. *Physics of Earth and Planetary Interiors*, 121, 2000, p.p. 103 – 137.

Proceedings RNAOPM-2024
Section 6. Computer science and its physical applications

- [2] *Trubitsyn, V.P., 2000.* Principles of the tectonics of floating continents // *Izvestiya. Physics of the Solid Earth.* V.36. P.708-741.
- [3] *Trubitsyn, V.P., Rykov V.V. 2000.* A 3-D spherical model of mantle convection with floating continents // U.S. Geological Survey, Open File Report, 00-218. P.2-44.
- [4] *Van der Lee, S., and G. Nolet, 1997.* Upper mantle S-velocity structure of North America // *J. Geophys. Res.* V.102. P.22815-22838
- [5] Van Schmus W.R. Natural radioactivity of the crust and mantle. *Global Earth Physics. A Handbook of Physical Constants.* AGU Reference Shelf 1. Am. Geophys., 1995, p.p. 283–291.
- [6] Q. Williams, E. Knittle, R. Jeanloz. The high-pressure melting curve of iron: a technical discussion. *J. Geophys. Res.*, 96 (1991), pp. 2171 – 2184.
- [7] O.L. Anderson, A. Duba. Experimental melting curve of iron revisited. *J. Geophys. Res.* 102 (1997), 22659 – 22669.
- [8] R. Böhler. Temperature in the Earth's core from melting point Measurements of iron at high static pressures. *Nature* 363 (1993), 534 – 536.
- [9] Stein, C., Schmalz, J., Hansen, U., 2004. The effect of rheological parameters on plate behaviour in a self-consistent model of mantle convection. *Phys. Earth Planet. Inter.* 142, 225-255.
- [10] Walzer, U., Hendel, R., Baumgardner, J., 2004a. The effects of a variation of the radial viscosity profile on mantle evolution. *Tectonophysics*, 384, 55-90
- [11] Roberts P.H., Gladzmaier G.A.. Geodynamo theory and simulations. *Review of Modern Physics*, Vol. 72, No. 4, 2000, pp. 1081 – 1123.
- [12] Parmentier E.M., Sotin C. and Travis B.J. Turbulent 3-D thermal convection in an infinite Prandtl number, volumetrically heated fluid; Implication for mantle dynamics. // *Geophys. J. Int.*, 1994, 116. 241–254.
- [13] Sotin C., Labrosse S. Three-dimensional thermal convection in an iso-viscous, infinite Prandtl number fluid heated from within and from below: applications to the transfer of heat through planetary mantles. *Physics of Earth and Planetary Interiors*, N. 112, 1999, P. 171 – 190.
- [14] A. Loddock et al. Temporal variations in the convective style of planetary mantles. // *Earth and Planetary Science Letters* 251 (2006) 79–89
- [15] Allen K. McNamara, Shijie Zhong. The influence of thermochemical convection on the fixity of mantle plumes. *Earth and Planetary Science Letters* 222 (2004) 485– 500
- [16] S. Zhong, M.T. Zuber, L. Moresi, M. Gurnis, Role of temperature-dependent viscosity and surface plates in spherical shell models of mantle convection, *J. Geophys. Res.* 105 (2000) 11063– 11082.
- [17] U. Hansen, D.A. Yuen, Extended-Boussinesq thermal – chemical convection with moving heat sources and variable viscosity, *Earth Planet. Sci. Lett.* 176 (2000) 401– 411.
- [18] N.L. Montague, L.H. Kellogg, Numerical models of adense layer at the base of the mantle and implications for the geodynamics at DU, *J. Geophys. Res.* 105 (2000) 11101– 11114.
- [19] A. Davaille, F. Girard, M. Le Bars, How to anchor hotspots in a convecting mantle? // *Earth Planet. Sci. Lett.* 203 (2002) 621– 634.
- [20] L. Wen, P. Silver, D. James, R. Kuehnel, Seismic evidence for a thermo-chemical boundary at the base of the Earth's mantle, *Earth Planet. Sci. Lett.* 189 (2001) 141– 153.
- [21] *Artemieva, I.M. and Mooney, W.D., 2001.* Thermal thickness and evolution of Precambrian lithosphere: A global study // *J. Geophys. Res.* V.106, B. P.16387-16414.
- [22] *Cazenave, A., Dominh, K., Allegre, C.J. & Marsh, J.G., 1986.* Global Relationship between oceanic geoid and topography. // *J. geophys. Res.* V.91, B. P.11439-11450.
- [23] Abbott D. H., Isley A.E. Extraterrestrial influences on mantle plume activity // *Earth Planet. Sci. Lett.* – 2002. – Vol. 205. –P. 53–62..
- [24] *Jordan, T.H., 1978.* Composition and development of the continental tectosphere // *Nature.* V.274. P.544-548.

Some Problems the Creation of Universal Theory the Computer Science

Trokhimchuck Petro P.

*Anatolii Svidzinskiy Department of Theoretical and Computer Physics,
Lesya Ukrainka Volyn' National University,
Lutsk, 43025, Ukraine*

Trokhimchuck.Petro@vnu.edu.ua, trope1650@gmail.com

The problem of the creation universal theory of computer science is one of the central problems of modern science [1 - 14]. This problem is connected with the development of this science. If at the beginning of the formation of this science, it developed according to technological and economic needs, now it is used for all fields of knowledge and types of human activity without exception. Therefore, such a science should include the main features of the problem of formalizing knowledge, reducing it to a "computer" form, and convenience and comfort in processing it [5]. A significant role in this is played by the computer-human dialogue. The less time we spend on this, the more modern computer technology and science.

The main element of a modern computer is a processor that deals with matrix calculations, [15]. In other words, one or another way we have to reduce the relevant problem to calculations, [5]. From this point of view, we can consider modern computer science as an extension of computational mathematics, as well as a deeper formalization of information theory, [5].

The problem of creating the foundations of computer science is closely related to the foundations of mathematics. As well as the foundations of mathematics in computer sciences, the problem of the completeness of the system of axioms is closely related. It was the problem of completeness (incompleteness) that led to a crisis in the foundations of mathematics. Thanks to tsomts, the main concepts of the foundations of mathematics can be attributed: to logical (B. Russell, A. Whitehead), formal (D. Hilbert, P. Bernays), and intuitionistic (L. Brauer, A. Geiting, S. Kleene and S. Wolfram) to the structural approaches of the foundations of mathematics, since they use one or more sections of mathematics to solve this problem, which, as a rule, have a closed structure. Gödel's theorem on incompleteness is considered a fundamental theorem for computer science as well [5]. This raises the question of creating a theory of open systems and developing criteria for creating such theories.

Roughly speaking the universal theory of computer science must be a theory of everything, [6]. Such theories must satisfy to six criteria, [5].

A typical representative of this theory is polymetric analysis – theory of variable measure and systems with variable hierarchy, [5], [12]. The main elements of this theory are functional numbers (generalized quadratic forms); generalized mathematical transformations (15 minimum types); information lattices; theory of information calculations; polymetric theory of measures and measurements and theory of hybrid systems, [5].

The theory of informational calculations made it possible to combine analog and numerical calculations into a single system. Its main principle of optimal (minimum) computation is the generalization of the principle of least action and the entropy laws of physics and information theory into a single "dimensionless" principle, owing to the de Broglie ratio from the thermodynamics of a point, [5, 12].

The hybrid theory of systems made it possible to combine all fields of knowledge, including verbal and non-verbal, and to classify them by complexity. The basis of complexity is the concept of completeness and the parameter of connectivity of the elements of the information construct, [5]. It was shown that only 10 minimal types of hybrid systems (systems of

formalization of the knowledge) exist, but the number of these systems may be however large, [12]. Thus, Polymetric Analysis may be represented as natural concept of foundations of mathematics (mathematics is précised knowledge [5]; variant of resolution centurial problem in Cybernetics (problem of information complexity) [12]) and a variant of foundations of Computer Science (realization of idea [12] of main concept the computer science). According to this, the main problem of computer science according to [12] is the formalization of the thesis “Everything that comes from the head is reasonable” [12].

In order to create a universal theory of computer science, we must rely this thesis [5] on the results of the development of the foundations of mathematics, information theory, and computer science.

References

1. Casti, *Connectivity, Complexity and Catastrophe in Large-scale Systems*. John Wiley & Sons, New York, 1979.
2. S. Beer, S. 1976. “We and complexity of the modern world,” in *Cybernetics today: problems and propositions*, Znaniye, Moscow, 1976, pp. 7 – 32. (In Russian)
3. L. Brillouin, *Science, and Information Theory*. Courier Corporation, New York, 2004.
4. S. Wolfram, *Metamathematics: Foundations & Physicalization*. Wolfram Media, Leipzig, 2022.
5. P. Trokhimchuck, *Theories of Everything: Past, Present, Future*. Lambert Academic Publishing, Saarbrücken, 2021.
6. *System Technical Journal*, vol. 27, pp. 379–423, 623–656, 1948.
7. Computer science/Wikipedia – the free encyclopedia. // https://en.wikipedia.org/wiki/Computer_science (Accessed 29/12/2023)
8. Computing/Wikipedia – the free encyclopedia. // <http://en.wikipedia.org/wiki/Computing> (Accessed 29/12/2023)
9. M. Minsky, *Computation: Finite and Infinite Machines*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1967.
10. F. H. George, *Philosophical foundations of cybernetics*. Abacus Press, Tunbridge Wells, 1979.
11. F. H. George, *Foundations of cybernetics*. Gordon and Breach Science Publishing, London, Paris, New York, 1977.
12. P. Trokhimchuck, “S. Beer Centurial Problem in Cybernetics and Methods of its resolution,” in *Advanced in computer science*, Mukesh Singla, Eds., vol. 7, ch.5, , AkiNik Publications, New Delhi, 2020, pp. 87-117.
13. S. C. Kleene, *Introduction to metamathematics*. North Holland, Amsterdam, 1965.
14. B. Russel, *Introduction to mathematical philosophy*. Museum street, London, 1948.

СИМУЛЯЦІЯ РОЗЧИНЕННЯ СОЛЬОВОГО КРИСТАЛУ У ВОДІ

Ю. Артюх, А. Тарасенко, Д. Шваліковський

Волинський національний університет імені Лесі Українки,

e-mail: dshvaliko@vnu.edu.ua

Розглянемо півпросторову задачу розчинення кристалу солі у водному розчиннику. Будемо вважати, що кристал розміщений у верхній частині посудини та частково занурений у розчинник. Для спрощення задачі нижню частину кристалу приймемо напівсферичною, тоді модель буде описувати сферично-симетричний випадок поширення (дифузії) молекул солі у нижньому півпросторі. При цьому тривимірність редукується до одновимірного випадку, де враховується лише залежність від радіальної складової r .

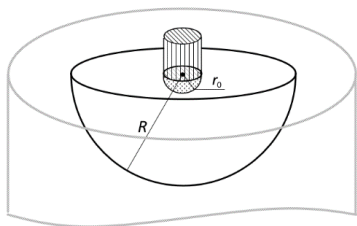


Рис 1. Геометрична модель задачі.

Загалом рівняння дифузії матиме вигляд

$$u_t(r, t) = \sigma u_{rr}(r, t) + F(r, t),$$

тут u – концентрація солі, σ – коефіцієнт дифузійного потоку, $F(r, t)$ – функція внутрішніх джерел, її приймемо рівною нулю, оскільки всередині посудини сіль відсутня. Дане рівняння розв’язуватимемо методом скінченних різниць, замінюючи похідні їх різницевиими відношеннями (s та h – часовий та просторовий кроки дискретизації):

$$u_t = \frac{1}{s}(u_{k+1} - u_k), \quad u_{rr} = \frac{1}{h^2}(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}).$$

Для обмеження задачі приймемо розмір зануреної частини кристалу $r_0 = 0.15$ см, межову точку інтегрування $R = 5$ см. Тоді симуляція поверхні концентрації солі у часі прийме вигляд Рис. 2(а), а на Рис. 2(б) та (в) вказані просторовий розподіл функції u на початковому (0.06 с) та кінцевому (3 с) етапах еволюції.

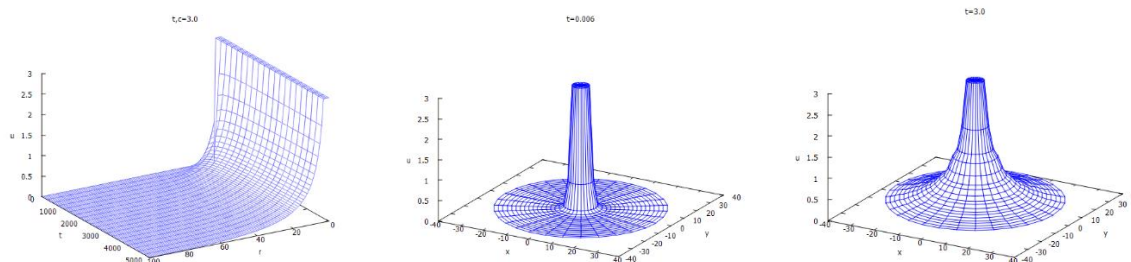


Рис 2.Повна розрахована поверхня (а); функція розподілу концентрації при $t = 0.06$ с (б), при $t = 3$ с (в).

Як видно, ступінчастий підйом на початку координат завжди зберігається, оскільки у ньому присутній кристал із 100% концентрацією солі. Із часом початковий циліндр починає розширюватись, заповнюючи простір. Подальший числовий розрахунок дає цілком очікуваний результат: для часу розчинення $t = 1000$ с циліндр стає займати всю область, обмежену радіусом R .

- [1] О. П. Пріщенко, Т. Т. Черногор. Диференціальні рівняння та їх застосування. – Харків, НТУ «ХПІ». – 2017.
- [2] A. Alharbi. Ordinary Differential Equations in Chemical Reactions. – Edinburgh, Department of Mathematics and Computer Science, Heriot Watt University. – 2017.
- [3] Д.М. Шваліковський. Моделювання процесів та систем у середовищі CAS Maxima. – Луцьк: ВНУ ім. Лесі Українки. – 2024.

INFRASTRUCTURE AS CODE: ВИКОРИСТАННЯ TERRAFORM У СИСТЕМІ «НАНОПЛАЗМОНІКА»

Бавдис Михайло, Болеста Іван, Кушнір Олексій, Калівошка Богдана

Львівський національний університет імені Івана Франка, кафедра радіофізики та комп'ютерних технологій, e-mail: bogdana.kalivoshka@lnu.edu.ua

Автори матеріалів розробляють апаратно-програмну систему «Наноплазмоніка» [1,2], яка має надати науковцям зручний, простий і доступний інструмент для проведення експерименту, моделювання та інтерпретації та представлення результатів. Однією з вимог, яку автори ставили перед системою, була кросхмарність для простоти міграції між сервісами різних вендорів та можливістю локального розгортання. Також, через універсальність проєкту його архітектура має набір суворих вимог, таких як гнучкість інфраструктури, підтримування безперервної інтеграції та безперервного постачання коду у хмару. Ймовірним вибором є інструмент Terraform [3] через його легкість у використанні з різними хмарними провайдерами, а також можливість автоматизації за допомогою IaC (Infrastructure as Code). За таких умов основною метою є розробка універсальності, автономності структури, яку можна було б легко інтегрувати у різні системи незалежно від екосистеми програм.

Інфраструктура як код – це модель автоматизації, яка передбачає написання коду, його тестування та виконання для визначення, розгортання, оновлення та видалення інфраструктури. Дотримання принципів IaC зменшує різницю між написанням додатків та розгортанням середовищ для них. Таким чином, можна взаємодіяти з серверами, базами даних, мережами, журналами та додатками [4].

Окрім підвищення зручності, це дозволяє отримати наступні переваги:

- Зниження вартості розробки. IaC дозволяє отримувати потрібну інфраструктуру та автоматично виконувати окремі завдання адміністрування. Це зменшує час та витрати на розробку, тестування та реліз продуктів.
- Зменшення ризиків. IaC дозволяє перевіряти всі зміни в системі керування версіями та, якщо потрібно, швидко «відкочуватися» до потрібної версії або контрольної точки.
- Підвищення кількості відтестованих частин. Infrastructure as Code дозволяє тестувати будь-які, навіть невеликі зміни. Для пошуку помилок можна застосовувати статичний аналіз та автотести.
- Спрощення обслуговування. Автоматизація за допомогою IaC виключає залежність від конкретного спеціаліста та дозволяє ініціювати процеси будь-якому користувачеві з команди. А декларативний підхід IaC дає змогу отримати будь-які необхідні ресурси.
- Забезпечення ідемпотентності. При IaC достатньо одного разу описати бажаний стан інфраструктури коду, щоб завжди отримувати однаковий результат. Це зручно, коли потрібно запускати десятки ідентичних інстансів: помилки та невідповідності виключені.

Є два основні підходи IaC:

- Декларативний. Користувач вказує, що необхідно отримати у результаті. Весь алгоритм дій на шляху до кінцевого результату надається провайдеру IaC-інструменту. Прикладами такого провайдера є Terraform, Puppet.
- Імперативний. Користувач крок за кроком визначає, що потрібно зробити, щоб прийти до потрібного стану. Приклади інструментів – Ansible, DSC.

Вже згаданий Terraform [3, 5, 6] є одним з найпопулярніших IaC-рішень, з ним працює близько 37% фахівців.

Terraform – це інструмент від компанії Hashicorp, який допомагає декларативно керувати інфраструктурою. Тобто не потрібно вручну створювати сервери, мережі тощо, у консолі хмарного провайдера достатньо написати конфігурацію, у якій буде викладено, як буде побудована майбутня інфраструктура. Така конфігурація створюється у читабельному текстовому форматі. Якщо потрібно змінити інфраструктуру, достатньо відредагувати конфігурацію, запустити terraform apply, і Terraform скерує запити до хмарного провайдера, щоб привести інфраструктуру відповідно до конфігурації, зазначеної у файлі [7-9].

Якщо перенести керування інфраструктурою у текстові файли, відкривається можливість озброїтися всіма потрібними інструментами для керування вихідним кодом і процесами, після чого вони переорієнтуються для роботи з інфраструктурою. Далі інфраструктура підпорядковується системам контролю версій, аналогічно до простого коду. Її можна рецензувати або повертати до більш раннього стану, якщо щось піде неправильно.

Основні аргументи, чому було вибрано Terraform для проєкту:

- На початку розробки апаратно-програмного комплексу не було зрозуміло, на якій хмарі розміщуватиметься наш код. Була ідея зробити систему крос-хмарною і не залежати від постачальників послуг. Тому вирішено, що потрібно мати інструмент, який не буде жорстко прив'язаний до хмарного сервісу.

- Репозиторій на GitHub має рейтинг більше 16 тисяч зірок, це добре підтвердження репутації проєкту. Наявність відкритого коду дозволяє дізнатися основні помилки та їх вирішення, просто поспілкувавшись з розробниками або з людьми, які також користуються інструментом, або ж просто оновивши систему чи версію плагіна. Це дуже зручно.

- Terraform як утиліта знаходиться повністю під контролем розробників і для розробників, що дає можливість встановлення на локальне середовище, на сервер, може легко вбудовуватись у CI pipeline, зроблений на базі будь-якого інструменту. До прикладу, для розробленої системи Terraform було вбудовано в GitLab CI.

- Terraform добре себе зарекомендував у перевірці стану інфраструктури.

Однак, Terraform, як і будь-який інструмент, має недоліки. Стосовно нашого проєкту, працюючи з ним можемо виділити наступні:

Функції. Незважаючи на те, що у Terraform досить велика кількість вбудованих функцій, не всі з них такі, які можна використовувати у повсякденному житті. Є у ньому незручні функції, наприклад “element” – у неї в деяких ситуаціях поведінка може бути не зовсім тією, яку очікували. Наприклад, використовуючи модуль, у нього передається count – скільки потрібно розгорнути інстансів, і передається список підмереж, розбитих по availability zone. Передали, застосували, збільшили кількість, ще застосували. А в майбутньому, наприклад, вирішили передати до нього збільшений список підмереж, і з'явилася сітка змін. Змінюється друга частина списку, а count із цим списком зіставляється через елемент.

Наприклад, було 4 availability zone до цього та 5 інстансів, а потім було додано ще одну availability zone — Terraform перші 4, які вже були по порядку, залишить. П'яту він перестворить — насправді, просто додасть її як нову. Такі помилки відбуваються через особливості роботи зі списками.

Тернарний оператор. У Terraform насправді не вистачає умов, а є тільки тернарні оператори. Хотілося б мати звичайні If і Else. На жаль, їх поки немає.

Складнощі командної роботи. Якщо велика команда або великий проєкт на велику кількість оточень або й те, й інше, тоді Terraform стає складно використовувати, не застосувавши CI.

Також Terraform має обмеження і не всі речі можна описати ним, як інфраструктуру. Що він не дозволить зробити:

- Terraform не дозволяє описати залежність між модулями, якщо вони є логічно на одному рівні. Із цим при розробці апаратно-програмного комплексу виникли проблеми. Був описаний модуль, який мав набір інстансів з усіма супутніми параметрами, та був модуль, який описував балансувальника. Коли потрібно було зістикувати їх, то на вхід другого модуля подавалось ID з першого модуля, що генерується. Так ось, поки не було створено інстанс – цей список ще не з’являвся в tfstate, і модуль з балансувальником не міг зібратися, тому що йому нічого було стикувати до себе. Тобто доведеться розгортати це у два проходи. Зробити залежність «спочатку розгорни цей модуль, а потім інший модуль» – не виходить. Як вирішення проблеми був розроблений підхід реалізації за рахунок того, що було розбито інфраструктуру по підсистемах і описано модуль, по-перше, для ресурсу, а по-друге – модуль для підсистеми. Саме ті самі інфраструктурні модулі, у яких вже було зістиковано їх на одному рівні.

- Terraform може успішно побудувати план, але цей план успішно не застосовується, тому що він не відслідковує, наприклад, кількість вільних IP у підмережах, які залишилися. Він не відстежує, що у деяких availability zone немає якихось інстанс-типів. Скажімо, використовуємо North Virginia, і там зараз є 6 зон доступності. У одній з них доступні в повному обсязі типи інстансів. Знову ж таки – план при цьому будується, все добре, Terraform нічого про це не знає.

- Terraform нічого не знає про ліміти в Amazon. Скажімо, ліміт – 200 машин, із них уже 198 розгорнули, а потрібно розгорнути ще 5. План успішно збудується. Але при виконанні плану він зробить дві, а ще для трьох поверне вам помилку від API Amazon.

- Також він не може врахувати, що деякі імена мають бути унікальними. Наприклад, потрібно зробити S3 bucket. Це глобальний сервіс на регіон, і навіть, якщо у обліковому записі не був створений сервіс із таким ім’ям, не факт, що його не створив хтось інший. І коли він створюватиметься за допомогою Terraform – він чудово побудує план, почне його створювати, і тоді Amazon поверне помилку. Наперед цього не передбачити ніяк. Тільки якщо мануально попередньо намагались зробити це заздалегідь, хоча це йде урозріз із самою ідеєю Infrastructure as Code.

Отже, Terraform — це потужний інструмент для автоматизації, який знайшов своє місце у нашій системі та буде й надалі використовуватись командою, однак цьому продукту ще є куди рости та змінюватись.

1. Bolesta I. Computational-Measurement System “Nanoplasmonics”. Part 1: Architecture / I. Bolesta, O. Kushnir, M. Bavdys, I. Khvyshchun, A. Demchuk // Proceedings of the 2019 IEEE Xlth International Scientific and Practical Conference on Electronics and information technologies (ELIT), September 16 – 18, 2019 Lviv, Ukraine. – pp. 51-54. <https://doi.org/10.1109/ELIT.2019.8892288>

2. Bolesta I. Computational-Measurement System “Nanoplasmonics”. Part 2: Structure of Microservices / I. Bolesta, O. Kushnir, M. Bavdys, I. Khvyshchun, A. Demchuk // Proceedings of the 2019 IEEE Xlth International Scientific and Practical Conference on Electronics and information technologies (ELIT), September 16 – 18, 2019 Lviv, Ukraine. – 55-58. <https://doi.org/10.1109/ELIT.2019.8892345>

3. Yevgeniy Brikman, “Terraform: Up and Running: Writing Infrastructure as Code 1st Edition”, O&Reilly Media, pp. 103-112, April, 2017

4. Rosemary Wang, “Infrastructure as Code, Patterns and Practices: With examples in Python and Terraform”, Manning, pp. 363-370, August 2022.

5. Scott Winkler, “Terraform in Action 1st Edition”, Manning, pp. 305-306, July 2021.

6. Mikael Krief, Mitchell Hashimoto, “Terraform Cookbook: Efficiently define, launch, and manage Infrastructure as Code across various cloud platforms”, Packt Publishing, pp. 235-240, October 2020.

7. Ankita Patil, Mitesh Soni, “Infrastructure Automation with Terraform: Automate and Orchestrate your Infrastructure with Terraform Across AWS and Microsoft Azure”, BPB Publications, pp. 138-139, May 2022

8. Russ McKendrick, “Infrastructure as Code for Beginners: Deploy and manage your cloud-based services with Terraform and Ansible”, Packt Publishing, pp. 78-80, May 2023.

9. Karen Tovmasyan, “Mastering AWS CloudFormation: Plan, develop, and deploy your cloud infrastructure effectively using AWS CloudFormation”, Packt Publishing, pp. 156-161, May 2020.

ПРО ОСОБЛИВОСТІ РОЗВИТКУ НАУКИ ТА ПІДПРИЄМНИЦЬКА ОСВІТА В СУЧАСНОМУ УНІВЕРСИТЕТІ

Болеста Іван Михайлович, Катерняк Ігор Богданович
Львівський національний університет імені Івана Франка
ivan.bolesta@lnu.edu.ua

Поняття "наука" має свої коріння в давньогрецьких думках великих мислителів, таких як Платон та Аристотель. Розвиток науки характеризується експоненційною функцією, де кількість вчених, наукових робіт та матеріальні витрати подвоюються протягом приблизно 40 років – періоду життя одного покоління. Цей експоненційний ріст призводить до того, що знання подвоюється за коротший час, зменшуючи період подвоєння з часом. Цей ріст науки перевищує ріст населення, збільшуючи частку людей, зайнятих у сфері науки, особливо в розвинених країнах (3-5% населення). Такий високий вплив науки на суспільство створює також загрози для цивілізації, викликані саме розвитком науки. У сучасному світі наука стає важливою складовою суспільної свідомості, втілюючи собою подвійну природу – як джерело знань і як потенційна загроза. Аналізуючи особливості розвитку науки у сучасний період, можна визначити серйозні відмінності в порівнянні з попередніми етапами розвитку, що варто ретельно розглядати.

Сучасна наука, яка сформулювалася за часів Ньютона, розвивалася шляхом **дивергенції** – виокремлення окремих дисциплін. Внаслідок цього, з натурфілософії, яка існувала до Ньютона, виникли природничі (nature) та гуманітарні (philosophy) дисципліни [1]. При подальшій дивергенції в рамках цих дисциплін виникли окремі науки: математика, фізика, хімія, біологія, соціологія, психологія та ін. Процес дивергенції наук тривав доволі довго, внаслідок чого сформувалися вузькоспеціалізовані знання.

Під таку структуру науки сформувалася **галузева економіка**. Така структура економіки є недружньою до природи, внаслідок чого виникають і становлять загрозу людству ряд екологічних проблем, а також є неефективною, особливо при розв'язанні складних завдань. Тому навіть у часи існування галузевої економіки формувалися інтегровані міжгалузеві технології для їхнього розв'язання.

В останні десятиріччя спостерігається зміна парадигми розвитку науки – спостерігається перехід від дивергенції до **ковергенції** – злиття наук. Яскравим прикладом цьому є виникнення нано- та біотехнологій, інформаційних технологій. Зараз на перший план виходять дослідження **когнітивних** проблем, які включають розвиток розумових процесів, вивчення яких потребує залучення вчених-гуманітаріїв.

Зміна структури організації науки супроводжується відповідними змінами у організації виробництва. Усі ми є свідками зникнення цілих галузей старої промисловості та появи принципово нових підходів до вирішення багатьох проблем. «У 21 столітті ми стикаємося з новим набором проблем: наші продуктивні можливості значно перевищують нашу здатність знати, що будувати. Головне питання нашого часу полягає не в тому, чи можна це побудувати? але чи варто його будувати?» [2].

У контексті розглядуваної проблеми на порядок денний виходить питання **зміни парадигми** підготовки спеціалістів у вищих навчальних закладах. У сучасній структурі науки кожен науковець у галузі природничих (і не тільки) наук повинен володіти глибокими знаннями з математики, фізики, хіміки, біології, програмування, інформаційних технологій. Відповідну підготовку вони можуть отримати на рівні бакалаврату, а на магістерському рівні – ставати математиками, фізиками, хіміками, біологами, які здатні виконувати роботи інноваційного характеру. Інновації виникають

з потреб, переваги з креативних рішень, унікальність з користі, які отримає користувач таких інноваційних продуктів, послуг, технологій. Драйвером змін, коли наукове рішення стає інновацією, а потім певною цінністю для окремої цільової групи, є підприємці.

В університетах потрібно розвивати підприємницьку культуру: науковці, дослідники не так часто співпрацюють міждисциплінарно і з підприємцями щоб «обгорнути» свої інновації в бізнес моделі, привабливі для інвесторів. Завдання полягає в тому, щоб запровадити підприємницьке мислення, відкрити університети для навколишнього суспільства та діяти в індустріальній екосистемі. З 2009 року Львівський національний університет імені Івана Франка (ЛНУ) спільно з Українською системою дистанційного навчання (УДЛ) ініціювали та адміністрували щорічну брокерську подію – Innovation Spring/Інноваційна весна, яка включає серію воркшопів «Від ідеї до ринку», навчальний курс «Підприємництво та інновації» та підсумковий «Інноваційний весняний форум», де студентські команди і молоді дослідники презентують свої технологічні стартап проєкти, зустрічаються з потенційними венчурними інвесторами, бізнес-ангелами та потенційними партнерами.

В рамках дослідження, спрямованого на вивчення ключових методів і підходів, які використовуються в університеті для розвитку підприємницької освіти, виявили запит на роботу в команді, гостьові лекції практиків, стажування в компаніях, розробка прототипів інноваційних продуктів і складання бізнес моделей, менторську програму.

Отже, «Інноваційна весна» є університетським контекстом для проєктного навчання студентів- створення стартапів, де студенти, використовуючи 4А «двигун» (Attention, Actualisation, Attraction і Action) [3], звертають увагу на проблеми в суспільстві та виявляють потреби окремих груп, генерують ідеї і розробляють міждисциплінарні рішення, представляють прототипи і валідують клієнта [5], складають бізнес моделі, діють, рефлексують і вчаться.

Таким чином, підприємницька культура в управлінні університетом, підприємницька поведінка студентів, викладачів та дослідників, міждисциплінарні дослідження та комерціалізація їх з допомогою стартапів чи спіноффів, навчальна програма з інновацій та підприємництва, перехід до дієвого навчання і розвиток контексту для підприємницької практики є тими рисами, які притаманні сучасним університетам [5].

Список літератури

1. Г. Іро. Про еволюцію сучасних наук (чотири книжки, що лягли в основу природничих наук). Обрії науки (збірка нарисів про науку і про вчених). За редакцією Ю.Головача та Я. Грицака. Видавництво Українського католицького університету. Львів. 2016. С.110 – 136.
2. E.Ries. The Lean Startup: How Constant Innovation Creates Radically Successful Businesses/ Ries Eric.-Portfolio Penguin, 2011.- 336 p.
3. I. Katernyak, V. Loboda, “Entrepreneurial Momentum for Sustainable Growth”. Sustainable Organizations – Models, Applications, and New Perspectives, Jose C. Sánchez-García and Brizeida Hernández-Sánchez, IntechOpen, 2020 Chapter 3, pp. 35-49.
4. S. Blank. Why the Lean Start-Up Changes Everything / Steve Blank. - Harvard business review. - May 2013.
5. Per Blenker, Poul Dreisler, Helle Meibom Faergemann, John Kjeldsen, A framework for developing entrepreneurship education in a university context.- International Journal of Entrepreneurship and Small Busines, Vol. 5, No 1, 2008, p. 45-63.

ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ У ВИВЧЕННІ КУРСІВ ЦИКЛУ COMPUTER SCIENCE: ВИКЛИКИ І МОЖЛИВОСТІ

Олег Вілігурський

*Волинський національний університет імені Лесі Українки, проспект Волі, 13, Луцьк,
Україна, 43025*

viligurskyi@gmail.com

З впровадженням прямого вільного доступу до чат-боту зі штучним інтелектом (ChatGPT у 2023 році [1], дещо пізніше – Google Bard і чат-бот Bing) при вивченні курсів програмування, алгоритмів і структур даних тощо з'явилися принципово нові можливості і виклики. Позитив тут цілком очевидний: швидкий і зручний доступ до відомих способів розв'язання класичних задач; можливість уникнути рутини відшукування нескладних, але тродосемких рішень підзадач при роботі над більш комплексними і нетривіальними проектами; джерело різних варіантів розв'язку задля вивчення і аналізу в процесі навчання. Але має місце і негативний вплив штучного інтелекту (ШІ) на освітній процес. І вплив цей перевищує очікування окремих аналітиків. Так, канадський письменник і культуролог Стівен Марш писав про «десять років, щоб наукові кола зіткнулися з цією новою реальністю: два роки, щоб студенти зрозуміли технологію, ще три роки, щоб професори визнали, що студенти використовують цю технологію, а потім п'ять років, щоб адміністратори університетів вирішували, що з цим робити, якщо взагалі робити» [2]. Однак особистий досвід показав, що після входження ChatGPT в інформаційний простір України, студенти навіть першого курсу вже в перший місяць почали його використовувати для діяльності, яка важко назвати академічно добродесною. Відповідно, вже у весняному семестрі викладачам доводилось шукати механізми зменшення можливого негативного впливу на освітній процес.

Можна проаналізувати [3] специфіку співпраці і боротьби з ШІ у наступних моментах.

1. **Класичні задачі.** Традиційні задачі на цикли, умови, списки тощо легко вирішуються чат-ботом. Тут практично нема шансів змусити студента виконувати завдання самостійно, якщо він хоче перекласти роботу на ШІ.

2. **Мовні особливості.** Інколи «перехитрити» ШІ можна, якщо врахувати те, що по замовчуванню він виконує завдання «думає» по-англійськи.

3. **Задачі з математичним змістом.** Досвід показує, що задачі з математики ШІ розв'язує гірше, ніж задачі з програмування. Тому доречно включати більше математичних елементів при постановці задач з програмування.

4. **Задачі з фізичним змістом.** Фізику ШІ поки що «розуміє» відчутно гірше, ніж математику. Навіть доволі прості задачі на рівняння теплого балансу ШІ розв'язує погано.

5. **Використання зовнішніх файлів.** Видається доцільним ускладнити діяльність штучного інтелекту, формуючи завдання так, щоб використовувались сторонні файли. Насправді, тут штучний інтелект цілком конкурентоздатний і дає раду зі задачами, які передбачають обробку файлів.

6. **Графічна компонента завдань.** Виявляється цілком конструктивною стратегія формулювання задач, коли суттєва частина інформації міститься у графічній формі. Це можуть бути креслення до задач, малюнки, які показують бажаний результат роботи програми, діаграми, блок-схеми тощо.

7. **Знаходження помилки у коді.** Можна змусити студентів самостійно розбиратись з програмним кодом, коли їм надається програмний продукт з «багами», а їм слід виправити помилки. Але тут знову таки потрібен вельми творчий підхід з боку викладача, щоб це завдання не виявилось надто простим для ШІ.

8. **Порівняння швидкодії різних розв'язків.** Не надто вдала ідея, хоча б тому, що такі завдання вже перестають бути завданнями на власне програмування.

9. **Перетворення блок-схем у код або навпаки.** Цей підхід може бути цілком продуктивним, адже давати раду з зображеннями ШІ поки що адекватно не вміє. Але готувати достатньо багато задач, які супроводжуються блок-схемами – дуже трудомісткий процес.

10. **Перетворення псевдокоду у код чи навпаки.** Цей підхід навряд чи доцільний, оскільки все, що просто формулюється словами, легко сприймається штучним інтелектом.

11. **Концептуальні завдання, завдання-проекти.** Використати чат-боти «в лоб» студентам не вдасться, якщо формулювати завдання таким чином, щоб кожне наступне було пов'язане з результатами роботи з попереднім завданням. Таким чином студент має справу з цілісним блоком завдань, певного роду проектом.

Як бачимо, від моменту входження в інформаційний простір чат-ботів зі штучним інтелектом процес спонукання студентів до сумлінної роботи при вивченні курсів програмування суттєво ускладнився. На це доводиться зважати, як і на те, що в майбутній професійній діяльності студенти зможуть використовувати ШІ як робочий інструмент. Відповідно, не слід розглядати його лише як те, з чим треба боротись. Натомість потрібно шукати шляхи продуктивного включення штучного інтелекту у освітній і самоосвітній процеси.

Список літератури

1. FEDOROV. Telegram. Прочитовано 20 лютого 2023. URL: <https://t.me/zedigital/2893> (дата звернення: 20.09.2023)
2. Marche S. The college essay is dead. Nobody is prepared for how AI will transform academia. The Atlantic. URL: <https://www.theatlantic.com/technology/archive/2022/12/chatgpt-ai-writing-college-student-essays/672371/> [Accessed September 20, 2023].
3. Вілігурський, О., Скіпальський, М. (2023). Вплив чат-ботів зі штучним інтелектом на процес викладання курсів із програмування. Фізика та освітні технології, 3, 13–18

КОМП'ЮТЕРНА МОДЕЛЬ МЕХАНІЧНОГО ШИФРАТОРА ДЖЕФЕРСОНА

Микола Головін, Дмитро Гузачов

Волинський національний університет імені Лесі Українки

Комп'ютерне моделювання різноманітних процесів матеріального світу в курсі практичного програмування є важливим досвідом для студентів природничої галузі знань. Особливе місце тут займають математичні моделі фізичних процесів. У цьому контексті цікаві програмні реалізації не тільки складних процесів, а також і реалізації взаємодій між простими механічними об'єктами, зокрема, такими, як механічні диски, що обертаються на спільній осі. Саме такий вигляд має механічний шифратор Джеферсона (рис.1). Програмна реалізація такого механічного шифратора, в якості демонстраційного прикладу, може бути цікава при вивченні масивів та рядків в курсі програмування. Ця ж задача може бути цікава для розгляду її в курсі криптографії.

Метою роботи є розгляд програмної реалізаціх моделі механічного шифратора Джеферсона.

Шифратор був придуманий у 90-х роках 18 століття майбутнім третім президентом США Томасом Джефферсоном. У комплект шифратора входило 36 дисків на металевій осі. Ребро кожного диска ділилося на 26 частин, де у випадковому порядку були записані букви [1]. Порядок букв на різних дисках різний. Оператор, обертаючи диски, набирив повідомлення, що мало шифруватись. Букви різних дисків, при цьому, розташовувались на одному рівні. Інші букви дисків теж, при цьому, вистроювались в рядки. Зрозуміло, що інші рядки виглядали, як безглузді набори букв. Будь який з цих рядків міг бути майбутньою шифрограмою. Адресат маючи аналогічний набір дисків, що розташовані в тому ж порядку, виставляв у рядок текст шифрограми. Тоді на іншому відповідному рядку з'являвся дешифрований текст. Нижче представлений текст програми, що моделює роботу механічного шифратора Джеферсона.

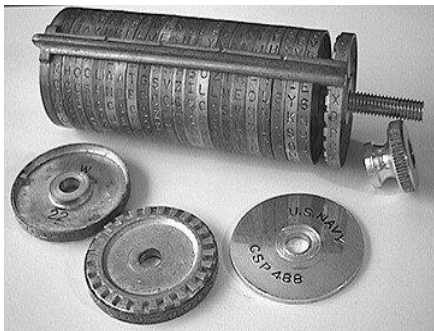


Рис.1 Шифратор Джеферсона

```

fileName=input("Вводь ім'я файлу ")
with open(fileName,'r') as f: text=f.read() # Завантаження тексту для шифр./дешифр.
pozShifr=int(input('Вводь позицію шифровки на дисках (шифр.: 5, дешифр.: -5)'))
diski= [ ' Z_WAXJGDLUBVIQHYPNTCRMOSFE ', ' KPBE_LNACZDTRXMJQOYHGVSFUWI ',
        ' BDMAIZ_VRNSJUWFHTEQGYXPLOCK ', ' RPLNDVHG_FCUKTEBSXQYIZMJWAO ',
        ' IHFRLABEUO_TSGJVDKCPMNZQWXY ', ' AMKGHIWPNYCJ_BFZDRUSLOQXVET ',
        ' GWTHSPYBXIZULV_KMRAFDCEONJQ ', ' NOZUTWDCVRJLXKIS_EFAPMYGHBQ ',
        ' XPLTDSRFHENYVUBMC_QWAOIKZGJ ', ' UDNAJFBOWTGVRSCZQKE_LMXYIHP ']
buff=""; result=""; k_disk=10; k=0 # Початкові параметри шифратора
for N in range(len(text)): # Цикл перебору букв тексту, що шифр.або дешифр.]
    if k ==10: k=0 # Переключення на з 9-того диску на 0 диск
    if text[N] in diskik[k]: # Пошук поточної букви тексту на поточному диску
        poz= diskik[k].index(text[N]) # Визначення poz позиції букви на диску
        # Перекрутка диска в положення фіксації букви та його друк
        diskik[k]=diskik[k][poz:27]+diskik[k][0:poz]; print(diskik[k])
        # Приклейка до шифровки чергової букви, що знаходиться
        result+=diskik[k][pozShifr]
    # Поставити знак відсутній на дисках (без шифровки)
    else: result +=text[N]
    k+=1 # Переключення на наступний диск
# Запис закод. або декод.повідомлення в файл
with open('textOut.txt', 'a') as f: f.write("\n"+result)
print('Вхідний текст ', text); print('Шифровка або деШифровка ',result)

```

У цій моделі 10 дисків, які реалізовані списком рядків `diski`. Окремий диск співставляється з окремим рядком в списку `diski`. Для зручності шифрування до знаків алфавіту доданий пробіл. Цей знак, далі по тексту, теж вважається алфавітним. Список рядків-дисків, що позначені в програмі `diski` є двовимірною структурою. Один вмір положення букви в рядку (на диску), а другий - номер рядка (диска).

Зрозуміло, що при такому підході візуалізація моделі буде дещо іншою, ніж було представлено вище. Диски будуть розташовані один над одним, а не в ряд (рис.2а). Тоді, текст буде читатись зверху вниз, а не зліва направо.

Організаційно, суть роботи програми наступна. У циклі з параметром `N` букви повідомлення по черзі піддаються шифруванню. Номер диску, на якому кожна чергова буква фіксується, контролюється змінною `k`. При перевищенні `k` значення 10 (кількість

```

Z_WAXJGDLUBVIQHYPNTCRMOSFE  HYPNTCRMOSFEZ_WAXJGDLUBVIQ
KPBE_LNACZDTRXMJQOYHGVSFUWI  E_LNACZDTRXMJQOYHGVSFUWIKPB
BDMAIZ_VRNSJUWFHTEQGYXPLOCK  LOCKBDMAIZ_VRNSJUWFHTEQGYXP
RPLNDVHG_FCUKTEBSXQYIZMJWAO  LNDVHG_FCUKTEBSXQYIZMJWAORP
IHFRLABEUO_TSGJVDKCPMNZQWXY  O_TSGJVDKCPMNZQWXYIHFRLABEU
AMKGHIWPNYCJ_BFZDRUSLOQXVET  BFZDRUSLOQXVETAMKGHIWPNYCJ
GWTHSPYBXIZULV_KMRAFDCEONJQ  WTHSPYBXIZULV_KMRAFDCEONJQG
NOZUTWDCVRJLXKIS_EFAPMYGHBQ  OZUTWDCVRJLXKIS_EFAPMYGHBQN
XPLTDSRFHENYVUBMC_QWAOIKZGJ  RFHENYVUBMC_QWAOIKZGJXPLTDS
UDNAJFBOWTGVRSCZQKE_LMXYIHP  LMXYIHPUDNAJFBOWTGVRSCZQKE
DLUBVIQHYPNTCRMOSFEZ_WAXJG

```

a

b

Рис.2 Стан дисків: а) до перекруту (ліворуч), б) після перекруту (праворуч)

дисків) `k` обнуляється. Повідомлення шифрується порціями по 10 знаків.

Сам процес шифрування, як зазначалось, реалізується перекруткою дисків. Шифруються тільки знаки алфавіту. Якщо черговий знак повідомлення, що шифрується, входить у склад алфавіту, то

запускається його пошук на поточному диску і відбувається перекрутка диска в положення фіксації букви. Положенням фіксації тексту, в цій програмі є перше в

поточному рядку-диску положення букви. Програмний перекрут чергового диска в положення фіксації букви реалізується зрізкою відповідного рядка до букви і після неї з подальшим обміном зрізок місцями. Перекрутами дисків-рядків досягається стан, коли на рівні фіксації повідомлення, тобто на лівому краю рядків утвориться фрагмент повідомлення з десяти знаків (рис.2b). Якщо текст перевищує 10 знаків, тоді шифрування починається знов з верхнього диску. Це ілюструється додатковим рядком – диском на рис.2b. При фіксації букв у стовпчик інші букви рядків-дисків теж вишикуються у відповідні стовпчики. Кожен з яких може виконувати роль шифрограми. Параметром `rozShift` користувач задає стовпчик, де буде зчитана шифрограма. У прикладі, це 5 стовпчик (в нульовому початковий текст).

Висновки

1. Видно, що речення HELLO_WORLD перетворюється в наступний шифрокод TCDGJRYDYHI. Цікавим криптографічним моментом є те, що три букви L в початковому коді виглядають в шифрограмі, як різні букви. Однакові ж букви шифрограми кодують різні знаки початкового тексту. Ці два моменти сильно ускладнюють злам подібного шифру, зокрема статистичним методом.
2. Ця програма може бути цікава в курсі навчального практичного програмування при освоєнні роботи з циклами, масивами (списками), рядками. У курсі криптографії, ця задача цікава, як яскравий представник механічних дискових шифрувальних пристроїв.
3. Модельна програмна реалізація шифратора Джеферсона відкриває перспективу на модельну реалізацію ще складнішої дискової електро-механічної шифрувальної машини Енігма. Злам шифру Енігми в ході другої світової війни у великій мірі був тим поштовхом, що стимулював появу перших комп'ютерів.

Література

1. Ф. Бауер. Методи та принципи криптології. - Світ, 2006. - 568 с.

ЗАСОБИ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ У МЕДИЦИНІ

Грабовський Володимир Андрійович

Львівський національний університет імені Івана Франка

volodymyr.grabovskyy@lnu.edu.ua

Технологічний прогрес останніх десятиріч зумовив значні зміни у підходах до вирішення проблем практично в усіх галузях людської діяльності, однак не так багато її сфер зазнали таких значних змін, як медицина. Визначний вплив на її розвиток справили багато новацій як наукового, так і технологічного плану. Особливе місце серед чинників, які спричинили фундаментальний вплив на розвиток медичної галузі протягом останніх десятиріч, займає впровадження в її практику досягнень, що стосуються використання методів, розроблених у царині штучного інтелекту.

За останні півстоліття інтеграція систем штучного інтелекту (ШІ) зумовила зміну не тільки засобів і методів лікування багатьох хвороб, але і самої парадигми охорони здоров'я. Їх застосування надало для широкого загалу медичних працівників можливість доступу до досвіду найфаховіших фахівців галузі у лікуванні різноманітних хвороб та розпізнаванні їхніх симптомів, змінивши цим не тільки точність діагностування важких і складних хвороб, а і самої стратегії їх лікування, поліпшити його результати для пацієнтів і самого процесу організації лікувальної справи. Незважаючи на порівняно невеликий проміжок часу (трохи більше 50 років), результати імплементації досягнень ШІ в медичній галузі є вражаючими – починаючи з поодиноких випадків застосувань деяких засобів штучного інтелекту в 1970-х роках (які стосувалися головно поширення досвіду унікальних фахівців галузі та розширення можливості його застосування широким загалом практикуючих лікарів і забезпечувалися впровадженням у лікувальну справу експертних систем) до використання різноманітних засобів алгоритмів машинного навчання та складних нейронних мереж у сьогоденні. Використання засобів ШІ в медицині показує втілення невпинного прагнення до інновацій та їхнього ефективного використання; головною метою тут є подолання проблем з діагностикою та лікуванням важких хвороб і покращення стану лікувальної справи загалом.

Хронологія використання засобів штучного інтелекту в медицині, починаючи з його зародження та до наших днів, показана на рис. 1 [1].

Як можна бачити з рисунка, починаючи з початкових етапів зародження штучного інтелекту спостерігалися постійні спроби використання його досягнень для створення програмних застосунків для медичної галузі, основним призначенням яких було, зокрема, покращення процесів діагностики хвороб та їх лікування. Це досягалося впровадженням у лікарську практику спочатку експертних систем, а далі – і через широке використання можливості покращення результатів розпізнавання зображень та аналізу даних з застосуванням підходів машинного і глибокого навчання. Як результат, сьогодні програми штучного інтелекту, які використовуються у медицині, включають експертні системи, широкий арсенал пристроїв на основі обробки природної мови, комп'ютерного бачення та доповненої реальності; останні використовують для вирішення конкретних проблем різноманітні алгоритми машинного та глибокого навчання [2].

У кінці 60-х і в 70-х роках минулого століття спостерігалось значне розчарування наукової спільноти у можливостях застосування наявних на той час нейронних мереж (персептронів), яке, разом з незадоволенням рівнем виконання багатьох наданих раніше “обіцянок штучного інтелекту”, зумовило переосмислення підходів до створення ШІ – основні зусилля у створенні його систем були зосереджені на розробці методів, які б імітували особливості вирішення проблем людським інтелектом, який приймає рішення шляхом розмірковування над процесом вирішення поставленої задачі. Це привело до

створення цілого класу систем ШІ – експертних систем (ЕС), які являють собою комп’ютерні програми, що використовують у своїй роботі бази знань про особливості задачі у вигляді набору фактів і правил і приймають рішення, імітуючи процеси їх прийняття людиною-експертом у даній галузі. У медицині за допомогою ЕС вирішуються питання створення можливості розширеного доступу практикуючих лікарів до унікальних знань і вмій найкращих представників галузі діагностики та лікувальної справи.

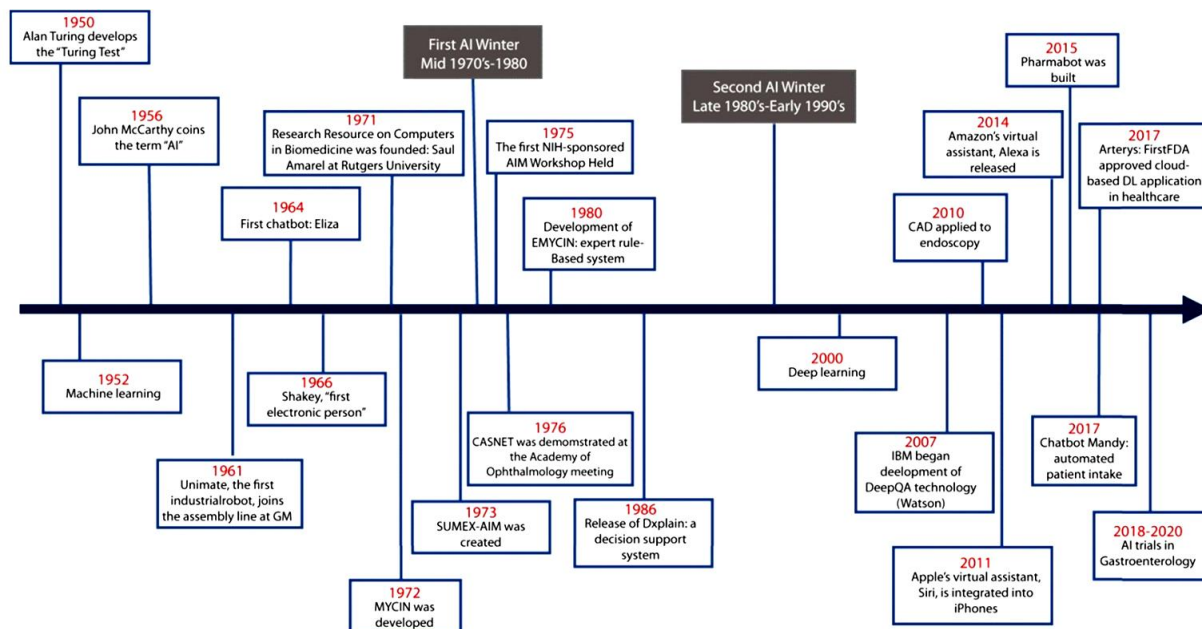


Рис. 1. Хронологія розвитку та використання засобів штучного інтелекту в медицині.

Перші експертні системи медичного плану були розроблені для діагностики захворювань та надання рекомендацій щодо лікування певних хвороб на основі використання великих баз даних клінічної інформації та досвіду наявних фахівців-експертів. Серед них важливе місце займає ЕС MYCIN [3], розробка якої була здійснена у Стенфордському університеті (США) в першій половині 70-х рр. минулого століття з метою покращення можливостей діагностики хвороб крові. Значення цієї системи полягає не тільки в тому, що вона надала можливість лікарям використовувати в лікарській практиці досягнення лікарів-експертів, а й тому, що при її створенні був отриманий неоціненний досвід у створенні експертних систем різного плану. Саме наукові і практичні результати, отримані при створенні перших ЕС, заклали основу для розробки цілої низки інструментів, які використовувалися і продовжують використовуватися в різних напрямках діяльності, у т. ч. і галузі медичної діагностики, зокрема – так званих оболонок експертних систем, з використанням яких були створені програми, які надали клініцистам можливість доступу до цінної інформації, накопиченої визначними фахівцями галузі у величезних сховищах медичних знань, та до їхніх вмій і досвіду.

З наближенням до кінця 20 століття зростали й можливості застосування досягнень ШІ в медицині. Поява і використання нових алгоритмів машинного навчання у 1980-х роках полегшила вилучення складних шаблонів із різноманітних наборів даних, розширивши можливості прогнозного моделювання та стратифікації ризиків – зокрема, і у медичній галузі [4, 5]. Для розвитку тих напрямків медичної діяльності, де зображення є центральними (як-от кардіологія, радіологія, патологія внутрішніх органів чи онкологія

[5]), особливо важливими виявилися можливості, які надав розвиток глибокого навчання, алгоритми якого представили нові, не бачені раніше можливості для діагностики хвороб, насамперед важких. Однак, швидкому розвитку їх використання стояли на заваді деякі ще не вирішені проблеми з реалізацією проведення ефективного навчання складних нейронних архітектур.

Початок 21-го століття став своєрідним переломним моментом в еволюції охорони здоров'я з підтримкою ШІ. Створення нових складних алгоритмів глибокого навчання, а головне – знайдені способи проводити навчання мереж з великими кількостями шарів обробки (чому сприяли роботи груп дослідників під керівництвом Д. Хінтона [6] та Дж. Бенджіо [7]) зумовили справжню революцію у їх застосуванні - зокрема, в розпізнаванні зображень та підвищення їх якості, що забезпечило безпрецедентний рівень точності діагностики в радіології [8], онкології (у т. ч. прецизійній [9]) та патології [10].

Завдяки своїй здатності покращувати діагностику, а також забезпечувати більш точну та ефективну медичну допомогу і полегшувати процес відкриття нових ефективніших ліків, засоби штучного інтелекту стали однією з визначальних рушійних сил сучасної галузі охорони здоров'я. Зокрема, пристрої з використанням ШІ можуть нині допомагати медичним працівникам виявляти непомічені ними (як безпосередньо, так і з використанням інших підходів) симптоми хвороб, покращуючи таким чином результати в охороні здоров'я. Для прикладу, створений з застосуванням методів ШІ інструмент для виявлення діабетичного захворювання очей, яке є однією з найбільш важливих нині причин зростання ризику погіршення і втрати зору, було перевірено на сотнях пацієнтів і він виявився надійним. Крім того, засоби ШІ можуть допомогти виявляти ранні ознаки діабетичної ретинопатії [11] (ускладнення діабету, яке може викликати серйозні порушення зору, такі як відшарування сітківки, а також й повну його втрату) і направляти пацієнтів до офтальмологів у разі виявлення підозрілих симптомів. Значні успіхи отримані також у лікуванні серцево-судинних, легеневих захворювань [5].

Водночас, розвиток сенсорних технологій, технологій зв'язку та Інтернету, поширення використання пристроїв індивідуального використання відкрило еру цифрового здоров'я, створюючи величезні потоки даних пацієнтів у реальному часі, які піддаються аналітиці на основі засобів ШІ. Це дозволило створити в 2010-ті роки фактично нові підгалузі медицини – телемедицину та дистанційний моніторинг, які використовують телемедичні платформи та системи дистанційного моніторингу для проведення дистанційних консультацій та віддаленого спостереження за пацієнтами [12]. Що забезпечує медикам нові можливості – від раннього виявлення захворювань до постійного моніторингу хронічних захворювань .

Використання досягнень ШІ останніх років дозволили створити чи не одне із найважливіших технологічних доповнень до хірургічних можливостей за останні два десятиліття – систем роботизованої хірургії [13], які забезпечують як більшу точність у проведенні хірургічних операцій, так і застосування менш інвазивних процедур їхнього проведення і, відповідно, швидше одужання прооперованих. Використання для проведення хірургічних втручань інтелектуальної робототехніки спрощує процедури втручання, усуває ефект мануального тремору хірургів, покращує загальну ергономіку та надає тривимірне (3D) бачення операційної області, яке зазвичай недоступне при використанні ручних мінімально інвазивних процедур. На даний час відомі і успішно використовуються декілька керованих людиною робототехнічних систем, серед яких однією з найбільш відомих є система da Vinci (Intuitive Surgical, США) [14]. Для підвищення можливостей та зручності використання роботизованих хірургічних систем,

розширення їхнього функціоналу та автономності застосування, останнім часом проводяться роботи по застосуванню в таких системах можливостей генеративного ШІ [15].

Важливою галуззю в охороні здоров'я є відкриття та розробка нових ліків, що є складним процесом, який потребує багато часу та ресурсів, і для його вдосконалення регулярно розробляються різні обчислювальні підходи. Сучасні підходи до вирішення цієї проблеми включають інтелектуальний аналіз даних, структурне моделювання, традиційне машинне і глибоке навчання [16]. Розробники ліків часто застосовують методи машинного навчання, щоб отримати потрібну інформацію з наявних великих баз даних хімічних сполук і розробити ліки з важливими біологічними властивостями. Використання засобів на основі машинного навчання може зробити відкриття ліків дешевшим і ефективнішим, а також пришвидшити їх створення, дозволяючи більш комплексно оцінювати клітинні системи та потенційні ефекти застосування ліків.

Проте розвиток ШІ в медицині не обійшовся без викликів – як технічного (необхідності відповідної кваліфікації медичного персоналу для успішного використання складних методик діагностики та лікування), так і етичного плану. Зокрема, має місце занепокоєння щодо конфіденційності даних пацієнтів, існуючої упередженості щодо рішень “логічно непрозорих” алгоритмів машинного навчання і зниження автономії лікарів у лікувальному процесі підкреслюють необхідність посилення вимог регуляторного нагляду відповідальності за інновації [17]. Крім того, імператив подолання “цифрового розриву” та забезпечення усім верствам населення справедливого доступу до охорони здоров'я з підтримкою штучного інтелекту внаслідок високої вартості відповідних методів лікування з його застосуванням залишається актуальною проблемою.

Незважаючи на існуючі проблеми, як технічного, так і етичного плану, роль ШІ в медицині продовжує динамічно розвиватися. Останнім часом було докладено значних зусиль у дослідженнях і розробках з метою створення нових засобів діагностики та лікування й перенести потенціал штучного інтелекту в клінічні застосування. Нові підходи, засновані на застосуванні засобів штучного інтелекту, продемонстрували свою надзвичайну ефективність у вирішенні багатьох завдань в галузі медицини, починаючи від інтерпретації медичних зображень та закінчуючи відкриттям ліків, що прискорює перехід до науково-обґрунтованої лікарської практики та персоніфікованої медицини. Персоналізація лікування передбачає підбір методів лікування з урахуванням індивідуальних характеристик пацієнта, таких як генетичні особливості його організму, клінічна картина захворювання та фактори ризику. Як показують уже досягнуті результати, саме застосування засобів штучного інтелекту, насамперед – машинного та глибинного навчання, дають вагомі підстави сподіватися на сприятливі наслідки розвитку медичної галузі і забезпечення здоров'я людей.

1. Kaul Vivek , Enslin Sarah, Гросс Seth A. History of artificial intelligence in medicine. – *Gastrointestinal Endoscopy*, 2020, V. 92, Is. 4. – Pp. 807-812.
2. Szydlo Shein G., Brodie R., Mintz Y. Human-Machine Collaboration. – In: *AI-Assisted Surgery: Balancing Autonomy and Expertise* [Internet]. Artificial Intelligence. IntechOpen; 2023. Available from: <http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.111556>
3. Shortliffe E.H., Davis R., Axline S.G. et al. Computer-based consultations in clinical therapeutics: explanation and rule acquisition capabilities of the MYCIN system. – *Comput. Biomed. Res.*, 1975, 8. – Pp. 303-320.
4. Prasad G.N.R. A review on open source and free expert system shells. – *Poonam Shodh Rachna*, 2022, Vol.1, Is. V. – Pp. 49-53.

5. Barragán-Montero A. et al. Artificial intelligence and machine learning for medical imaging: A technology review. – *Phys Med*, 2021, 83. – Pp. 242-256.
6. Hinton, G. E., Osindero, S. & Teh, Y.-W. A fast learning algorithm for deep belief nets. – *Neural. Comp.*, 2006, 18. – Pp. 1527–1554.
7. Bengio, Y., Lamblin, P., Popovici, D. & Larochelle, H. Greedy layer-wise training of deep networks. – In *Proc. Advances in Neural Information Processing Systems*, 2006, 19. – Pp. 153–160.
8. Zhou S. K, Greenspan H., Davatzikos C., et al. A review of deep learning in medical imaging: Imaging traits, technology trends, case studies with progress highlights, and future promises. *Proc IEEE Inst Electr Electron Eng.* 2021 May;109(5):820-838.
9. Philip, A.K. et al. Artificial Intelligence and Precision Medicine: A New Frontier for the Treatment of Brain Tumors. – *Life*, 2023, 13, 24.
10. Ahmad Z. et al. Artificial intelligence (AI) in medicine, current applications and future role with special emphasis on its potential and promise in pathology: present and future impact, obstacles including costs and acceptance among pathologists, practical and philosophical considerations. A comprehensive review. – *Diagn Pathol.*, 2021,16(1):24.
11. Grzybowski, A., Brona, P., Lim, G. et al. Artificial intelligence for diabetic retinopathy screening: a review. – *Eye*, 2020, 34. – Pp. 451–460.
12. Craig J, Patterson V. Introduction to the practice of telemedicine. *Journal of Telemedicine and Telecare.* 2005; 11: 3–9.
13. Mayor N., Coppola A. S. J., Challacombe B. Past, present and future of surgical robotics. – *Trends in Urology & Men’s Health*, 2022, vol.13, Is. 1. – Pp. 7-10
14. C. D’Ettorre et al. Accelerating Surgical Robotics Research - A Review of 10 Years With the da Vinci Research Kit. *IEEE Robotics & Automation Magazine*, vol. 28, no. 4, pp. 56-78, Dec. 2021
15. Pandya A. ChatGPT-Enabled daVinci Surgical Robot Prototype: Advancements and Limitations. – *Robotics.* 2023; 12(4). – 97.
16. Aliper A. et al. Deep Learning Applications for Predicting Pharmacological Properties of Drugs and Drug Repurposing Using Transcriptomic Data. – *Mol. Pharmaceutics*, 2016, Vol.13. – Pp. 2524–2530.
17. Alowais, S.A. *et al.* Revolutionizing healthcare: the role of artificial intelligence in clinical practice. – *BMC Med. Educ.*, 2023, 23, 689.

КОНЦЕПТ «ДЕРБІНГ» – «ВІЛЬНИЙ; СЛУГА; РОБІТНИК; ГОРЯНИ ТА ІНШЕ»

Данильченко Павло Іванович

ДНВП «Геосистема», pavlodanylchenko@gmail.com

Якщо за лексикою саме балтські мови є найбільш близькими до санскриту, то праслов'янська мова є найбільш близькою як до більш архаїчної сатемної ведичної стародавньоіндійської мови, так і до стародавньокитайської мови, що згідно з дослідженнями Цун-тунг Чанга [1] була індоєвропейською мовою. До того ж перша держава на теренах Китаю Шан-Інь була державою зовсім не пращурів хуася чи ханьців, а насправді пращурів праслов'янськомовних сарматів та тунгузькомовних маньчжурів, що на протязі багатьох тисячоліть мешкали черезсмужно без будь-якої ворожнечі переважно в високогірних улоговинах. Якщо завдяки лексиці позбавлену флексій туранську за граматику англійську мову і можна вважати індоєвропейською, то маньчжурську мову тим паче слід вважати праслов'янсько-стародавньокитайською мовою. Адже вона має дуже багато не тільки лексичних, а і граматичних сходжень з праслов'янською мовою [2].

На те, що пращури більшості чувашів темно-червоношкірі горяни гуни савіри (жуни сувари), караболгари та каракозари прийшли до Європи з Далекого Сходу разом зі слов'янськомовними темно-червоношкірими сарматами та аланами-торками свідчить велика кількість чувасько-евенських та чувасько-корейсько-японських лексичних ізоглос, більшість з лексем яких мають праслов'янське походження [2, 3] подібно тим, що приналежать до концепту «дербінг» – «свобідний, вільний; слуга; робітник; чистити, очищати; дерти, луб, кора, деревина; дьоргати, смикати, дорога, шлях; обличчя, лоб, череп; черево; ярмарок, дерібан; горяни; тервінги, черв'яни, серби, сармати; араби, арамейці, вірмени та інше»:

чув. «тарсәй» / *тарбә < *тәрб- > *сәрб-, евенк. «кәлүмә» / *[c]кәлүбә < дәрүбә > *склаб- > *склав-, «гәрбән» / *сәрбән < *тәрб- < *дәрб-, япон. «dorei» / *der[b]ei – слуга; чув. «ирёк» / *[c]ир[б]ёк < *дёрб-, «шалпар» / *салбар < *сәрб- < *тәрб- < *дәрб-, евенк. «дэрүмкйн» / *дәрбкйн[г], «чумку» / *ту[р]бгу < *дэ[р]бгу, «тѳнмукйт» / *тәрбукйт < *дәрб- – «слобідний / свободний, вільний; де[р]белий»; чув. «тирпейлө» / *дирбейлө – «вільний від бруду; чистий»; евенк. «дылам» / *дыраб – «чистий [про звук]»; чув. «сул» / *дул, кит. «dàolù», кор. «dolo», себ., яван. «dalan», япон. «dōro» – «звільнений від рослинності прохід; дорога, шлях»; чув. «сурәк» / *дур[б]әк, евенк. «дәрбилгәчә, дэлпәргәчә» – «вільний проміжок [в суцільній деревині]; тріщина», «дәрбилгә-мй / дэлпәргә-мй» – тріснути; чув. «чәрмала», «тәлпала» / *дәрбала, евенк. «талумәде-мй» / *дарбәде-мй, монг. «цууранхай» / *диур[б]анг-, «урах» / *дур[б]а[н]г – «дербти / дерти, здирати [шкіру, луб, кору]»; чув. «тир» / *дәр, маньчж. «sukū» / *sukū[ra] – шкіра, чув. «чөрей» / *дөрэй, нан. «дэрәл», евенк. «дэрә» – «поверхня голови, що вільна від волосся; обличчя», евенк. «дәллә» / *дәрбә – «череп, лоб»; чув. «хуп» / *луб, «хупә» – «луб, кора», нан. «хоракта», діал.-евенк. «эрәктә» / *д[д]эрәбтә – кора, евенк. «дәллә» / *дәрбә – «кора, поверхня дерева; деревина»; чув. «хәрәмла» / *дәрәбла – «звільняти від кіптяви, бруду»;

чистити», евенк. «гэрбэ-мй» / *дэрбэ-мй – «звільняти, очищати дерево від гілок; обрубувати суччя», чув. «сарамас» / *дарабас – «роздітий, голий, оголений [первинно про обдертий стовбур, що не має гілочок]», евенк. «чиримчā» / *дирибчā – «дикі [вільні] рослини: цибуля чи часник, що не мають гілочок; черемша / *деребша»; чув. «сельдерей» / *дерберей, япон. «serori» / *der[b]ori, кор. «selleoli» / *derbeoli, монг. «селедерей» – «дика [некультивована, вільна] рослина; селера»; чув. «ярмәркка»¹ / *[д]эрб[т]орг- – «відторгання, торгівля за вільними цінами; ярмарок», евенк. «дярбан» / *дэр[и]бан, *дэрб[т]ор[г] – «велике стійбище; ярмарок»; евенк. «ирэмймэтчэ-мй» / *[д]эрб- – «ходити [в гості]»; маньчж. «yabumbi» / *[d]ya[r]bumbi, кит. «yóuli» / *[d]yóuli – «ходити [повільно]» (слова, що походять від праслов'янської лексеми *derbing > *terb[ing] > *s[e]rb > [*srb // *sueb-] > *slebodan > slob[od]an > sloven > slav- // sveb[odan] > svav – «слобідний / свобідний, вільний; свеб = серб; шваб = словен; германець / гермундур = серменд / жирмунт» і є спорідненими лексемам: *derib > dulib – «вільна, нежняжа людина; дуліб²»; *paderbnyk > *paserbnyk – «нерідна = вільна дитина»; *derbun[g] > *t[é]r]vun > tivun – «вільнонаймана людина = слуга в Київській Русі; тивун»; прасл.-і.е. *derb^h- – «терebити / *дербити; шкрябати; здирати; злупити; зрізати [звільняючи від чогось]»; прасл. *der[b]ga[m]ti > *d^brgati – «звільняти від рослинності; дьоргати, смикати, тягти, рвати»; *der[b]ga > *dorga – «звільнений від рослинності прохід, проїзд; дорога, тропа, стежка»; *der[bm]ti > *derti – «дерти, здирати; звільняти від кори чи будь-якого іншого поверхневого шару»; *derbo > *dervo – «звільнений від кори будівельний матеріал = деревина³»; *[su]derb[m]ti > *serbti – «звільняти [очищати⁴] від домішок метал»; *[su]derebro > sudrabs, serebro – «очищений метал; срібло⁵»; *derbo > *červo – «вільна від будь-чого порожнина; черево⁶»; *derb > *čerp- – «кістяк голови, звільнений від мозку; щось обдерте; череп»; *derbo < *derdo > *žrdio – «вільна частина будь-чого суцільного = отвір; шийка великої посудини для вина; жерло»; *derba > *torba > *korab – «вільна ємність для речей; торба, короб»; *derb' > *želbъ – «пристрій для вільного стоку води; жолоб»; *derbent – «вільний прохід»; *derberey > *serberey > *selderey – «вільна [дика, некультивована] рослина»; *derb > *terv > *črvъ – «вільний прохід для їжі; черв'як, хробак; змія»; *derbec' > *žerbec' – «звільнившись з черева та ще досі вільний від вузди кінь, тобто жеребець»; *derbec' > *vorbъсь – «вільний, дикий птах; горобець»; *derab > *žeravъ – «вільний, дикий птах; журавель»; *derb[t]org > *jemark > *jāmark – «торгівля за вільними цінами; ярмарок»; *deryban⁷ – «звільнення нерухомості від державної опіки»; *dereb > *žerbъjъ – «спосіб звільнення вій відповідальності за прийняте рішення, уживаний з метою довільного встановлення певної черговості, прав та обов'язків на щонебудь, оснований на випадковості; жереб»; *deribat – «довільне похідне; дериват [споріднене лат. «derivatus» – відведений]»; прасл. *derbend > *sermend, нім. «Diener» / *De[rb]ner, лит. «tarnas» / *der[b]nas, вірм. «tsarra» / *tsarba < *derba, лат. «servus»⁸ / *derbus – «вільна, незалежна людина, що прихильна до когось; слуга»; лтс. «brīvība» / *d[e]rib-, лаос. «seliphab» / *derib-, узб. erkinlik / *[s]er[b]kin- < *derb- – свобода; англ. «derby» – «висока непокрита [звільнена від покриття] посудина; котелок»; турец. «serbest» / *derb- – «вільний, безкоштовний»; перс. «talk» – визволитися; лит. «drabažas» – «відпала кора»; рум. «țelină», блг. «целина» / *дер[б]ина, мкд. «целер», словц. «zeler», чес. «celer» / *der[b]er – селера; грец. «δρόμος», рум. «drum» / *d[e]rub, порт. «caminho»,

франц. «chemin» / *de[r]bin, лтс. «ceļu» / *deru[b] – «дорога, шлях»; н.-луж. «jermank», «jemark» / *der[b]mark < *derbtorg, адиг. «ермэлыкъ» / *[д]эрб[т]орг – «торгівля за вільними цінами; ярмарок»; франц. «marche», англ. «market» / *torget – «ринок, торг»; англ. «bargain» / *torgain, нім. «Markt», лит. «derėtis» / *der[b]jėtis – торг; галіс. «burato» / *durabo, словц. «diera» / dier[b]a, хрв. «rupa» / *[die]ruba, мкд. «дупка» / *ду[р]бка – «вільний прохід через перепону; дюрка, дірка»; япон. «kubo» / *du[r]bo, тадж. «холї» / *дорї[б], англ. «hollow» / *dorob, лтс. «dobi» / *do[r]bi, пол. «dziupla» / *dziurba – дупло; япон. «karappo» / *darabo – «незайнятий, вільний; порожній»; пол. «dziurawy» / *diuraby – дірявий).

Вочевидь, гуни савіри (темношкірі) були антропологічно змішаним народом, – так званими зараз, гуранами. Їхня шляхта була нащадками слов'янськомовних сарматок, що одружували своїх синів переважно з жінками дружніх алано-сарматських племен. Адже навіть до самого падіння маньчжурської династії Китаю його імператриці одружували своїх синів лише на жінках зі шляхетного європеїдного роду нірунів (ніра). І навіть наложниць для майбутніх імператорів Китаю обирали переважно саме з цього славетного роду.

На те ж, що шляхетні маньчжури у гіршому випадку були лише гуранами⁹, тобто незначно метисованими нащадками слов'янськомовних сарматів, вказує не лише наявність великої кількості слов'янсько-маньчжурських ізоглос, а і майже відсутність у них всіх типових монголоїдних рис (а саме, чорне, але не жорстке волосся, добре профільоване, а не сплюснене обличчя, великий ніс, що не слабо, на відміну від монголоїдів, а навпаки дуже сильно виступає, відсутність азійської розкосості очей і смаглявість замість жовтини шкіри). Саме про це свідчить і опис вигляду китайської імператриці – вольової нащадки сарматів нірунки Цисі¹⁰ [2, 3].

«Всі дами увійшли до аудієнц-зали, в якій вже перебувала на троні імператриця, що овдовіла... За кілька кроків від Цисі, з лівого боку, на такому ж троні сидів імператор¹¹ Гуансуй. Вона середнього зросту, добре складена, але тримається дещо сутулуватю. Її обличчя довгасте, чисте, смагляве, ненабілене і ненарум'янене. Очі чорні, невеликі, у них видно розум і проникливість, дуже живі й анітрохи не розкосі, а нагадують своїм розміром мигдалину...» [4].

Список літератури

1. Чанг, Цун-тунг: Індоевропейська лексика в старокитайській мові, <https://publikationen.uni-frankfurt.de/frontdoor/index/index/year/2009/docId/7147>.
2. Данильченко, П.: 2024, Хрестоматія зі стародавньої історії праслов'янськомовного сарматського суперетносу і його генетичних нащадків: стародавнього аланського і античного германського споріднених суперетносів, а також і українського-давньоруського етносу середньовічної України-Русі, <https://elibrary.com.ua/m/articles/download/12624/3881>, <https://elibrary.com.ua/pavlovin>, https://chtyvo.org.ua/authors/Danylchenko_Pavlo/.
3. Данильченко, П.: 2024, Божественне військо, <https://elibrary.com.ua/m/articles/download/12724/3892>, <https://elibrary.com.ua/pavlovin>, https://chtyvo.org.ua/authors/Danylchenko_Pavlo/.
4. Сідіхменов, В. «Маньчжурські правителі Китаю», <http://maxima-library.org/opds/b/241458?format=read>

¹ Можливо, це вже пізня форма слова, що суттєво змінилася під впливом російського слова «ярмарка».

² Даури > таври, тевкри > савари / савіри / сувари, севера = сіверяни > гебри, гавеляни / гевели > каурави, кавари; *деріби = дуліби > тервуниани / *терви = тервінги > серби / сорби, сорти / сарти, кельт.

«сліаби» = *слави = свави > хороти / хорутани, хорали, хорвати > гаруди, герули > карпи, карінти, кроати; далмати > серменди / сармати / сарбати > галмати; д'араби, д'арамейці, д'армяни [вірмени] – «горяни; вільні люди».

³ Раніше як праїндослов'яни, так і більшість праїндоевропейців використовували для позначення дерева та деревини інший термін, пов'язаний не зі звільненням дерева від кори, а з дуже великою його висотою: *mond < *bond / *bend < *bord / *berd < *berg – «височина; висока рослина; дерево, деревина»; лат. «mont-» – «височина, гора»; нідерл. «boom» / *boon[d], нім. «Baum», алб. «pemë» / *bemë, лит. «medis» / *be[n]d- – дерево; англ. «wood» / *bo[n]d, франц. «bois» / boi[n]d, порт. «madeira», ісп. «madera» / *ma[n]dera, ірл. «(adh)maid», лит. «medienos» / *be[n]d- – деревина.

⁴ Баск. «garbi», лит. «švarus» / *dar[b]us, лтс. «tirs» / *dir[b]s, малай. «bersih» / *der[b]sih – «звільняти від шкірки, кожури, бруду; чистити».

⁵ Лтс. «sudrabs», «sidrabs», лит. sidābras, гот. «silubr», д.-в.-нім. «silbar, silabar», д.-англ. «seolfor, siolofr», д.-фриз. «sēlover», д.-ісл. «silfr», франк. «снідерл», англ., швед. «silver», с.-в.-нім. «Silber», япон. «shirubā» – срібло; пекче «siri» – метал; акк. «sargu» – «очищене срібло [праїндослов'янське запозичення]», «sargu» – «очищати, виплавляти».

⁶ Праїндосл. *derbhaḥ > *sārbhaḥ > снскр. «gārbhaḥ» – «материна утроба, черво [вільна утроба]; зародок».

⁷ Цей термін, що хоч і має праслов'янське походження, сучасні слов'яни, вочевидь, запозичили у евенків.

⁸ Отже, слугами, як і славетними слов'янами чи склавинами, на відміну від прислуги можуть бути лише самодостатні та вільнолюбні люди, а зовсім не поневолені люди, а тим паче і не добровільні раби (хлопи): «Служити б радий, прислужуватись тошно» [Грибоедов]. Маньчж. «gebu / *de[ɣ]bu, нан. «гэрбу», евенк. «гэрбй» / *дэрбй – ім'я; евенк. «гэрбэн» / *сэрбэн < *тэрб- < *дэрб-, «кэлүмэ» / *c[кэлүбэ < дэрүбэ > *склаб- > *склав-, япон. «dorei» / *dor[b]ei, япон. «sābanto» / *dā[ɣ]banto, монг. «зарц» / *дар[б]ц, чув. «тарсă» / *тарбă < *тэрб- > *сэрб- – слуга; евенк. «дэрүмкйн» / *дэрбкйн[ɣ], «чумку» / *ту[р]бгу < *дэ[р]бгу, «тйнмукйт» / *тэ[р]букйт < *дэрб-, чув. «ирёк» / *c[ир[б]ёк < *дёрб-, «шалпар» / *салбар < *сэрб- < *тэрб- < *дэрб- – «слобідний / свободний, вільний»; нан. «дэбомби» / *дэ[р]бомби, себ. «trabahante» / *darbahante – робітник; нан. «дэбон» / дэ[р]бон – праця (від прасл. *derbing – «вільний; послужливий; іменитий; родовитий; шляхетний; володар гербу»); лит. «darbuotojas» – «слуга, працівник»; бенг. «śramika» / *d[a]rbika, катал. «treballador» / *derballador, порт. «trabalhador», франц. «travailleur» / *darbailleur, лтс. «darbiniece», лит. «darbininkas», нім. «Arbeiter» / *D[ar]beiter – робітник; лит. «tarnas» / *dar[b]nas, алб. «shërbëtor» / *dërbëtor, англ. «servant», лат. «servus», італ., порт. «servo» / *derbo – слуга; лат. «private» / *d[e]ribate – приватний; англ. «tear» – дерти».

⁹ В давнину гуранами / *уранами, вочевидь, називали нащадків монголоїдних матерів і європеїдних батьків горців. Адже праманьчж. *гура, евенк. «ур» – гора, а евенк. «гуран» – несвійський (вільний, гірський) козел.

¹⁰ Зі сарматського шляхетного племені Ніра = Нірун = Жуань-жуань, шляхта якого, як і Татари, Тадзанс та Таджики = Сарті / Сорти = Сорби, була нащадками слов'янськомовних Манів і Сяньбі = Сербів = Серів.

¹¹ Отже, навіть, якщо маньчжурські імператори Китаю і не були за чоловічою лінією нащадками слов'янськомовних сарматів, то обирали собі дружин і наложниць переважно з дружнього сарматського шляхетного клану європеїдів нірунів. І завдяки цьому вони дистанціювалися не лише від китайців, а і від маньчжурського простонароддя, а також і успадкували розумові здібності від сарматських батьків своїх матерів. А тим самим за розумовими здібностями вони фактично були сарматами, – П.Д.

МОДЕЛІ ГЛИБИННОГО НАВЧАННЯ ДЛЯ РОЗПІЗНАВАННЯ ЗОБРАЖЕНЬ НА МОБІЛЬНИХ ПЛАТФОРМАХ

Миронюк Дмитро Мирославович, Благітко Богдан Ярославович

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
факультет електроніки та комп'ютерних технологій
myronyukdmytro@gmail.com, blagitko@gmail.com*

I. ВСТУП

Штучний інтелект є провідним напрямком сучасної науки, який широко досліджується та впроваджується у повсякденне життя людства. Велику роль у його розвитку зіграв швидкий розвиток апаратних засобів, які дають змогу виконувати великий обсяг обчислень за прийнятний час. Останніми роками однією із головних проблем є перенесення обчислень, які відносяться до обрахунку алгоритму машинного/глибинного навчання на малопотужні спеціалізовані платформи. Це дає змогу забезпечити прийнятну швидкість обчислень разом із суттєво меншим споживанням енергії, що суттєво покращує автономність та незалежність таких пристроїв від потужних хмарних платформ. Разом із цим, вимоги до такого типу платформ постійно зростають, і виникають нові проблеми портування та впровадження тих чи інших алгоритмів на них. Спостерігається суттєвий прогрес у розвитку спеціальних мікроконтролерів та мікрокомп'ютерів, які мають у своєму складі апаратні прискорювачі різної потужності та продуктивності. Проте, багато розроблених систем обмежуються рівнем симуляції, що зменшує практичне значення таких розробок.

В цій роботі основним завданням є доповнення та розширення знань щодо продуктивності різних типів мобільних платформ, а також проектування прототипу інтелектуальної системи на основі граничних (edge) обчислень з максимальною автономністю. Основну увагу під час роботи приділено максимізації швидкості роботи алгоритму глибинного навчання безпосередньо на платформі із максимально можливим наближенням до виконання алгоритмів глибинного навчання у реальному часі. При цьому враховуються можливості платформи та особливості підходів до оптимізації моделей з мінімальним пониженням точності моделі.

II. ФОРМУВАННЯ РЕПРЕЗЕНТАТИВНОГО НАБОРУ ДАНИХ МОДЕЛІ ГЛИБИННОГО НАВЧАННЯ ДО НАВЧАННЯ

У якості цільових пристроїв для дослідження було обрано класичні класифікаційні моделі глибинного навчання та моделі для локалізації об'єктів, а у якості обчислювальних платформ для виконання – популярні рішення, які використовуються іншими дослідниками у процесі виконання практичних завдань з інтеграції моделей глибинного навчання у системи з обмеженими обчислювальними ресурсами.

Для стабільної роботи та якісної підготовки системи на основі класифікатора глибинного навчання необхідною умовою є наявність сформованого набору даних, які є репрезентативними для кожного класу даних, який буде детектовано системою. Існує пряма залежність між кількістю даних на клас, які будуть застосовані для навчання моделі та продуктивністю готової моделі. Як показано у дослідженнях [1,2], у разі збільшення кількості фотографій на клас, середня точність класифікації росте експоненційно для більшості прийнятих метрик. Разом з тим, такий розподіл та кількість вхідних фотографій також залежить від обраного методу навчання мережі, оскільки навчання «з нуля» вимагає більшої кількості даних навчального набору для встановлення вагових коефіцієнтів класів. Інший метод – покращення існуючої моделі з адаптацією – вимагає меншої кількості даних. Однак, у цьому випадку необхідний правильний вибір моделі, яка буде застосовуватись для до навчання. Задачі мають бути близькими за сутностями даних та їх структурою. Тоді можна досягти вагомих результатів з суттєво меншим набором даних.

Інша проблема, яка виникає під час збору даних – нерівномірність зібраних даних. Це означає, що кількісний розподіл зображень між класами даних є нерівномірним. Як наслідок,

використання таких даних під час навчання призводить до гірших результатів розпізнавання для класів з недостатньою кількістю даних для навчання. Для подолання цієї проблеми було розроблено низку методів, які допомагають зменшити вплив небалансу даних для різних класів. Нижче наведено основні техніки подолання нерівномірності даних у задачах глибинного навчання [3]:

- Робота зі зразками. Тут варто виокремити два методи: штучне збільшення кількості зразків (oversampling) та штучне зменшення кількості зразків (undersampling). Ці методи вважаються класичними для роботи із нерівномірно розподіленими даними та можуть застосовуватись як окремо, так і разом ізольованим способом. Метод штучного зменшення кількості зразків полягає у зменшенні кількості зразків для класів, які мають суттєве перевищення у порівнянні із класами, для яких зібрано менше даних. Метод штучного збільшення кількості зразків працює аналогічно, але замість зменшення кількості зразків домінуючого класу ми збільшуємо кількість зразків мінорного. Правила вибору таких класів, а також методика прорідження зразків може варіюватися залежно від конкретного випадку. Найбільш простими вважаються методи на основі випадкового вилучення (у випадку вилучення зразків домінуючого класу) [4]. Недоліком такого типу методів є можливе перенавчання для методів штучного збільшення та втрата важливих даних для методів штучного зменшення. Багато сучасних методик працює на основі алгоритму k-сусідніх для вибору найбільш віддалених зразків з точки зору властивостей та цінності для навчання. Одним з найбільш яскравих прикладів такого алгоритму є SMOTE (synthetic minority oversampling technique), де застосовується подібність зразків мінорних класів для штучного збільшення зразків [5,6].

- Використання функції навчання з урахуванням похибки для зразків, які класифікуються хибно. Прикладом такого алгоритму можна назвати AdaCost, який працює на основі підходу навчання AdaBoost [7].

Реалізована кібер-фізична модель розпізнавання зображень на мобільних платформах [8]. Для візуалізації зображень використане штатне підключення фотокамери – OV5640 5MP USB Camera AF. Набори даних формувались для типу Transfer Learning. Характеристики вхідного набору зображень до попередньої обробки приведені в Табл. 1.

Характеристики власного вхідного набору даних. Табл. 1

Характеристика	Значення
Кількість унікальних зображень	300
Кількість класів	6
Аугментація	Yes (rotation, perspective, scaling, mosaic)
Розмір зображення	640x640 RGB

III. МОДЕЛІ ГЛИБИННОГО НАВЧАННЯ ПІД ЧАС ТА ПІСЛЯ НАВЧАННЯ

Основним алгоритмом роботи є модель глибинного навчання на основі згорткової нейронної мережі. Такого типу модель використовує накладання фільтрів різної кількості та розмірності для коректного виділення властивостей під класифікацію. Для підготовки прототипу та апробації запропонованого комбінованого алгоритму захоплення було проаналізовано велику кількість мобільних моделей для глибинного навчання [9]. Результатом стало виділення декількох архітектур, які і були використані у якості основних під час роботи алгоритму.

Для вибору моделі було використано наступні критерії:

- первинна перевірка швидкості роботи моделі на стаціонарній та мобільній платформі (робота попередньо навченої моделі із використанням стандартного широкого з точки зору кількості класів набору даних ImageNet);
- аналіз можливості та зручності розгортання моделі та підвищення швидкості її роботи на цільовому пристрої;

- зручність квантизації операторів моделі для її оптимізації після навчання;
- критерій достатньої точності моделі для характеристик зображень, які будуть оброблятися за допомогою обраної моделі.

Відповідно до цих критеріїв було визначено список моделей для тестування на мобільних платформах (Табл. 2).

Моделі для розгортання на мобільних платформах. Табл. 2.

Архітектура	Кількість параметрів (набір моделей torchvision [10])
GhostNet	2,218,512
NasNetMobile	2,542,856
Mobilenet	3,504,872
MobileNetV2	5,288,548
EfficientNetB0	7,225,885
YOLOv5n	2,218,512

Для тестування було використано програмний каркас Pytorch моделі YOLOv5n. Кількість класів тестування – 10, кількість зображень – 100. Було використано оригінальні попередньо натреновані моделі для коректного співставлення результатів.

IV. ВИСНОВОК

Внутрішня неоднорідність, паралельність і чутливість щодо часу розпізнавання зображень створюють багато проблем. Реалізована кібер-фізична модель розпізнавання зображень на мобільних платформах показала задовільні результати.

Список літератури

1. Cho J., Lee K., Shin E., Choy G., Do S. How much data is needed to train a medical image deep learning system to achieve necessary high accuracy. arXiv: Learning (2015). URL: <https://arxiv.org/pdf/1511.06348.pdf> (Accessed: 28.01.2024).
2. Shahinfar S., Meek P., Falzon G. How many images do I need? Understanding how sample size per class affects deep learning model performance metrics for balanced designs in autonomous wildlife monitoring. Ecol. Informatics 57: 101085 (2020) URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1574954120300352> (Accessed: 28.01.2024).
3. Shahinfar S., Meek P., Falzon G. How many images do I need? Understanding how sample size per class affects deep learning model performance metrics for balanced designs in autonomous wildlife monitoring. Ecol. Informatics 57: 101085 (2020) URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1574954120300352> (Accessed: 28.01.2024).
4. Li H., Li J., Chang P. C., Sun J. Parametric prediction on default risk of Chinese listed tourism companies by using random oversampling, and locally linear embedding's on imbalanced samples. International Journal of Hospitality Management, vol.35, pp.141–151, 2013.
5. Chawla N.V., Bowyer K.W., Hall L.O., Kegelmeyer W.P., SMOTE: Synthetic Minority Over-Sampling Technique. J. Artificial Intelligence Research, vol. 16, pp.321-357, 2002.
6. ONNX | Home. ONNX.ai. URL: <https://onnx.ai/> (Accessed: 28.01.2024).
7. Mathew J., Luo M., Pang C. K., Chan H. L. Kernel-based smote for SVM classification of imbalanced datasets IECON-2015, pp.1127-1132
8. Sandip Roy, Sajal K. Das, Principles of Cyber-Physical Systems. Cambridge University Press October 2020, URL: <https://doi.org/10.1017/9781107588981>
9. Lepelaars C. The Evolution of Mobile CNN Architectures. wandb.ai. URL: https://wandb.ai/carlelepelaars/mobile_architectures/reports/The-Evolution-Of-Mobile-CNN-Architectures--VmlldzoyMDQ0ODQ (Accessed: 28.01.2024).
10. Models and Pretrained Weights. Pytorch. PyTorch. URL: <https://pytorch.org/vision/stable/models.html> (Accessed: 28.01.2024).

МОДЕЛЮВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ГЕКСАГОНАЛЬНИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛІВ ЗА ДОПОМОГОЮ КОМПЛЕКСУ ПРОГРАМ АВІНІТ

Сиротюк С.В., Мицишин Р.В.

Національний університет «Львівська політехніка» stepan.v.syrotiuk@lpnu.ua

Метод проєкційних приєднаних хвиль (PAW, projector augmented waves) [1] поєднує риси псевдопотенціала і все електронного методу приєднаних плоских хвиль. Хвильова $|\psi_n\rangle$ та псевдохвильова $|\tilde{\psi}_n\rangle$ функції зв'язані між собою так:

$$|\psi_n(\mathbf{r})\rangle = |\tilde{\psi}_n(\mathbf{r})\rangle + \sum_a \sum_i (|\phi_i^a(\mathbf{r})\rangle - |\tilde{\phi}_i^a(\mathbf{r})\rangle) \langle \tilde{p}_i^a | \tilde{\psi}_n \rangle, \quad (1)$$

де $|\phi_i^a(\mathbf{r})\rangle$ – атомна хвильова функція, $|\tilde{\phi}_i^a(\mathbf{r})\rangle$ – псевдохвильова функція, а $\langle \tilde{p}_i^a |$ – функція проєктор. Підсумування в (1) провадиться за сферами приєднання, які нумеруються індексом a , а індекс $i = \{n, l, m\}$ відповідає квантовим числам – головному, орбітальному й магнітному, відповідно.

З рівняння (1) бачимо, що

$$|\psi_n(\mathbf{r})\rangle = \tau |\tilde{\psi}_n(\mathbf{r})\rangle, \quad (2)$$

де оператор τ перетворює псевдохвильову $|\tilde{\psi}_n(\mathbf{r})\rangle$ у все електронну хвильову функцію $|\psi_n(\mathbf{r})\rangle$.

Явна форма оператора τ впливає з рівняння (1):

$$\tau = 1 + \sum_a \sum_i (|\phi_i^a\rangle - |\tilde{\phi}_i^a\rangle) \langle \tilde{p}_i^a|. \quad (3)$$

Стационарне рівняння Шредингера

$$H|\Psi_n\rangle = |\Psi_n\rangle \varepsilon_n \quad (4)$$

з урахуванням (2) набуває наступного вигляду:

$$\tau^+ H \tau |\tilde{\Psi}_n\rangle = \tau^+ \tau |\tilde{\Psi}_n\rangle \varepsilon_n, \quad (5)$$

у якому шуканий спектр електронів ε_n такий, як і в рівнянні (4).

Електронна густина у методі PAW визначається трьома доданками [2]:

$$\rho(r) = \tilde{\rho}(r) + \sum_a (\rho^a(r) - \tilde{\rho}^a(r)), \quad (6)$$

Перший доданок – плавна псевдогустина $\tilde{\rho}(r)$, яка зображується за допомогою перетворення Фур'є

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{n\mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} |\tilde{\Psi}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{G}} \tilde{\rho}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}, \quad (7)$$

де $f_{n\mathbf{k}}$ – числа заповнення одноелектронних станів, \mathbf{k} – вектор з першої зони Брилюена, n – номери заселених електронами зон, Ω – об'єм елементарної комірки, \mathbf{G} – вектор оберненої ґратки кристала.

Для все електронної функції формула (7) мала б такий вигляд:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{nk} f_{nk} |\Psi_{nk}(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{G}} \rho(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}. \quad (8)$$

Між формулами (7) та (8) є дуже суттєва відмінність. Вона полягає у тому, що рівняння (7) потребує для розвинення ряду Фур'є $\sim 10^3$ векторів \mathbf{G} , тоді як для досягнення однакової з рівнянням (7) точності розрахунку їх потрібно використати у (8) $\sim 10^6$. Отже, оперування все електронною функцією $|\psi_n(\mathbf{r})\rangle$ у кристалі робить задачу (4) нездійсненною щодо розв'язання навіть на суперкомп'ютерах.

Наступні два доданки густини електронів всередині сфери приєднання визначаються за допомогою спроектованих коефіцієнтів заселення станів:

$$W_{ij}^a \equiv \sum_{nk} f_{nk} \langle \tilde{\Psi}_{nk} | \tilde{p}_i^a \rangle \langle \tilde{p}_j^a | \tilde{\Psi}_{nk} \rangle, \quad (9)$$

а саме:

$$\rho^a(r) = \sum_{ij} W_{ij}^a \varphi_i^{a*}(r) \varphi_j^a(r), \quad (10)$$

$$\tilde{\rho}^a(r) = \sum_{ij} W_{ij}^a \tilde{\varphi}_i^{a*}(r) \tilde{\varphi}_j^a(r). \quad (11)$$

Ідея методу PAW полягає в перетворенні рівняння Шредингера до такого рівняння, у якому невідомою функцією стану є $|\tilde{\Psi}_n\rangle$. Якщо ж вона знайдена, то за допомогою (1) отримується все електронна функція стану $|\Psi_n\rangle$. Через останню знаходимо густину електронів та відповідний їй потенціал Хартрі. Обмінно-кореляційний потенціал був обраний у формі PBE0 [3–7]

Розрахунки електронних властивостей матеріалу гексагональної структури ZnCrSeS були виконані за допомогою комплексу програм Abinit [8]. Моделлю структури слугувала надкомірка $Zn_{31}Cr_{16}Se_{16}S_{16}$. Структурні параметри надкомірки були

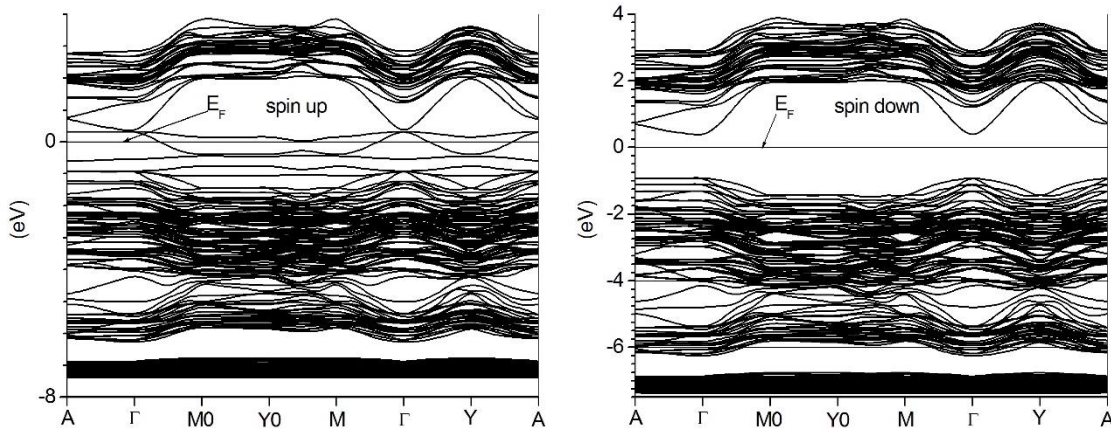


Рис. 1. Електронні енергетичні спектри матеріалу ZnCrSeS зі спінами вгору (up) та вниз (down).

оптимізовані за двома кроками. Перший етап полягав у оптимізації параметрів комірки a та c , а на другому оптимізувались координати її атомів. Результати наведені на рисунках 1-3.

Криві на рис. 1 вказують на те, що матеріал ZnCrSeS виявляє властивості металу для електронів зі спіном вгору, і напівпровідника – для електронів зі спіном униз.

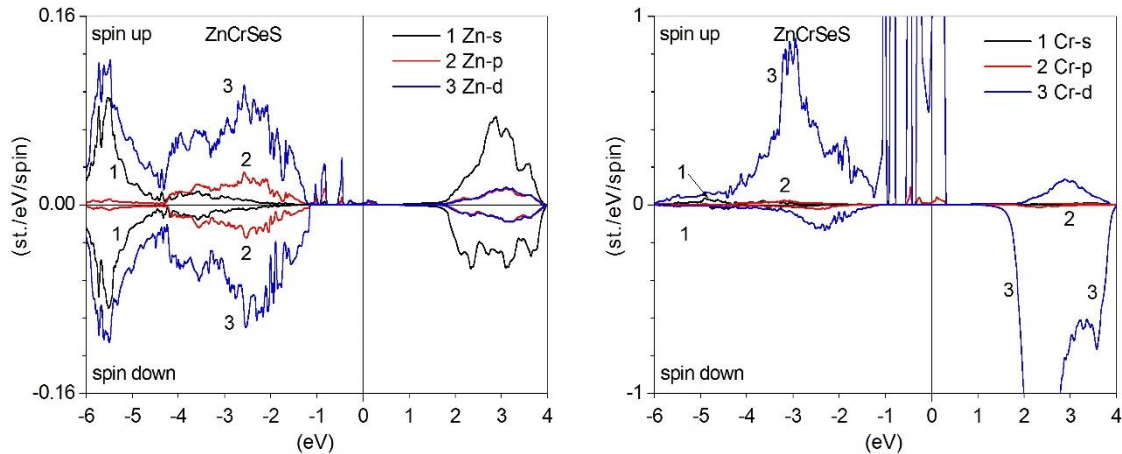


Рис. 2. Парціальні густини електронних станів Zn та Cr в матеріалі ZnCrSeS зі спінами вгору (up) та вниз (down).

Криві густини станів (рис. 2) виявляють домінування станів 3d Zn у глибшій частині валентної зони, тоді як стани 3d Cr тотально переважають в околі рівня Фермі для електронів зі спіном вгору.

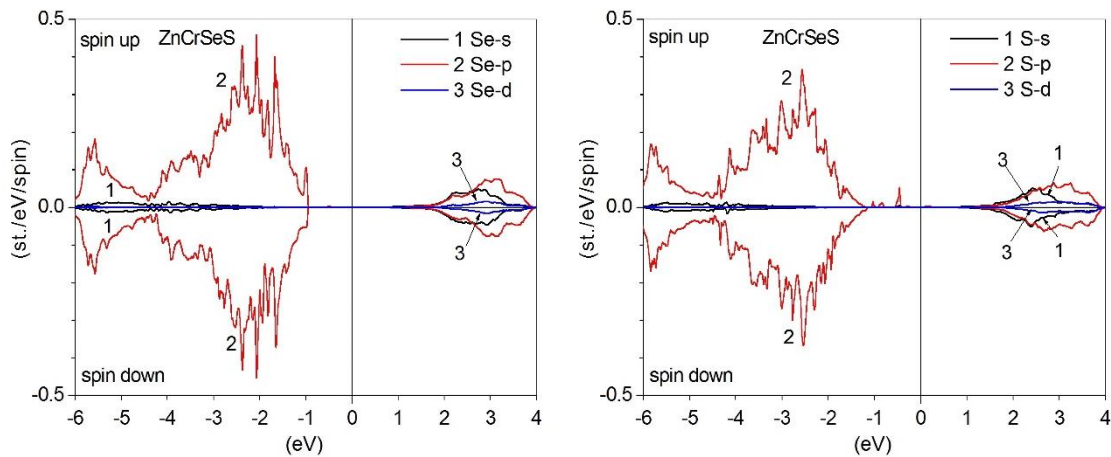


Рис. 3. Парціальні густини електронних станів Se та S в матеріалі ZnCrSeS зі спінами вгору (up) та вниз (down).

Криві густини станів (рис. 3) виявляють домінування станів p симетрії Se та S у глибшій частині валентної зони, тоді як в околі рівня Фермі вони відсутні.

Висновок. Матеріал ZnCrSeS виявляє напівметалеві властивості, тобто для спіна вгору він є металом, а для спіна вниз – напівпровідником. Значить, його можна розглядати кандидатом для застосування у спіновій електроніці.

Список літератури

1. Blöchl P. E., Phys. Rev., 1994, B **50**, No. 23, 17953–17979.
2. Tackett A.R., Holzwarth N.A.W., Matthews G.E., Computer Phys. Comm., 2001, **135**, 348.
3. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M., Phys. Rev. Letters, 1996, **77**, No. 18, 3865-3868.
4. Ernzerhof M., Scuseria G.E., J. Chem. Phys. 1999, **110**, 5029-5036.
5. Novák P., Kunes J., Chaput L., Pickett W.E., Exact exchange for correlated electrons, Phys. Stat. Sol. 2006, (b), **243**, No. 3, 563-572.
6. E. Tran, P. Blaha, K. Schwarz, P. Novák, Hybrid exchange-correlation energy functionals for strongly correlated electrons: Applications to transition-metal monoxides, Phys. Rev. 2006, B **74**, No.15, 155108(10).
7. F. Jollet, G. Jomard, B. Amadon, Hybrid functional for correlated electrons in the projector augmented-wave formalism: Study of multiple minima for actinide oxides, Phys. Rev. 2009, B **80**, No. 23, 235109(8).
8. Gonze X., Amadon B., Anglade P.-M., Beuken J.-M., et al., ABINIT : First-principles approach of materials and nanosystem properties. *Computer Physics Communications*, 2009, **180**, pp. 2582-2615.

The COVID-19 vaccine contains the SV40 oncogene

Yoichi Arai

Chernivtsi Bukovinian State Medical University
yoichiarai@yahoo.de

So how do you create a vaccine for COVID-19? Plasmid DNA, used in genes such as *E. coli*, is circular DNA that contains the information to make spike proteins. During cultivation, the amount of circular plasmid DNA increases. Then, by cutting part of this plasmid DNA and replacing the mRNA where the DNA is cut, the genetic information is created to create the spike protein. In other words, mRNA is created by cutting only the genetic information in the part of the plasmid DNA that forms the spike protein. By converting only the DNA that can form the spike protein into mRNA, it became possible to produce large quantities of the spike protein.

This modified mRNA is then placed inside lipid nanoparticles and coated with polyethylene glycol to complete the vaccine. This is an mRNA vaccine (messenger RNA vaccine). The plasmid DNA contained in such a final vaccine becomes a tool for genetic modification, so it must be removed and only the part that produces the mRNA is purified and placed into nanoparticles.

However, when American genome analysts analyzed the genomes of vaccines from two companies, Pfizer and Moderna, they discovered that they contained DNA in addition to mRNA. Moreover, the contaminated DNA was circular in shape. Plasmid DNA has bands of different sizes, and this is the genetic information that creates proteins. Moreover, Pfizer's plasmid DNA contained SV 40. This SV 40 (simian virus 40) is a cancer virus that infects monkeys and humans. SV 40 is called a promoter and has the ability to recombine the genome for infection with high efficiency. The SV 40 gene is genetically linked to cancer, so when SV 40 is integrated, the human gene is immediately integrated, creating the possibility of cancer. Moreover, if this SV 40 were DNA, it would be able to penetrate the nucleus of a human cell very efficiently. If SV 40 remained as mRNA, it would take time to enter the cell as reverse transcriptase would be required to enter the cell nucleus. However, because plasmid DNA is the very device that allows substances to enter cells, it causes genes such as *E. coli* to become resistant to antibiotics and penicillin. This is the basis of genetic engineering. If SV 40 were introduced into the nucleus of a human cell, the genetic information would rewrite the person's genes.

What about the Pfizer case? The Spike protein gene causes circulatory problems by producing the spike protein, but if the SV 40 gene is introduced, there is a possibility of cancer. In this sense, an oncogene can continue to be expressed in a cell until the cell dies. This is a huge problem abroad, but in Japan experts do not deal with this issue.

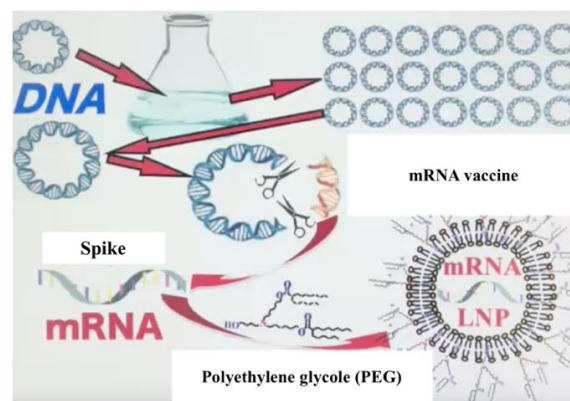
Because different types of vaccines are produced and each vaccine has a lot number, it is necessary to re-examine all vaccines. The Pfizer vaccine specifically contains this oncogene called SV 40, so it is necessary to look again at why an unnecessary oncogene was added to the vaccine during the vaccine manufacturing process. Did someone intentionally and with malicious intent mix in the SV 40 oncogene?

SV 40 enters the nucleus of human cells in the form of DNA and remains there until the cell dies. In other words, this oncogenic gene remains permanently in the cell nucleus until the cell dies. In addition, because Spike proteins are foreign substances, they become targets of immune attack and their cells are also more likely to die. However, when these cells die, gene expression stops and immune cell attacks stop. In the case of a surge, rather than SV 40, immune cells

respond to the surge, and if oncogenes are expressed during this time, cancer occurs. However, if these spikes form on the surface of cells throughout the body, immune cells begin to attack cells throughout the body. For example, if spikes form on the surface of cells such as heart cells, lung cells or germ cells, if spikes form on the surface of these cells, immune cells will treat these cells as foreign substances and attack them.

What happens to these lipid nanoparticles when they enter the human body (pharmacokinetics) has been studied in detail in experiments on rats. When the Spike protein enters the bloodstream, about 30% of it accumulates in the human spleen and liver. Spleen and liver cells are initially cells that capture and process foreign substances. Many spike proteins assemble in the spleen and liver. However, the third place where spike proteins accumulate is in the bone marrow. Human blood volume is 5 liters (L), and 50% of it is made up of 2.5 liters (L) of blood cells. The bone marrow continues to produce 2.5 liters (L) of blood cells every day. In other words, there are many hematopoietic stem cells (HSCs) in the bone marrow. If oncogenes reach such areas, such as the bone marrow, leukemia can occur. This is the third organ where spike proteins tend to invade.

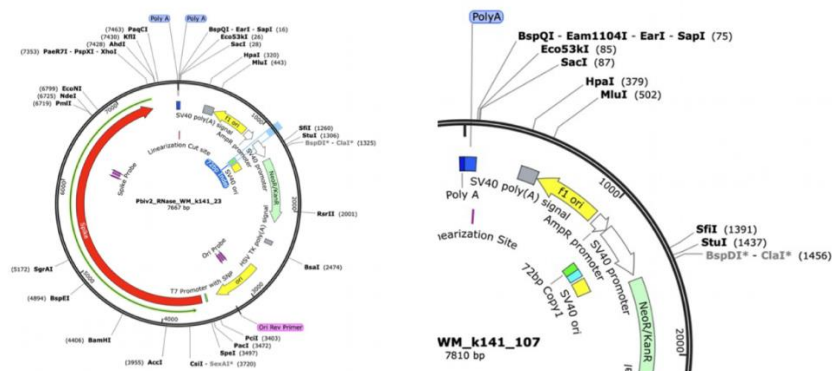
The fourth organ where proteins are most likely to end up is the ovary. The fifth organ where spike proteins tend to invade is the adrenal glands. Therefore, hormonal metabolism is disrupted. The spike protein then enters the male epididymis (epididymis), the site where the next generation of sperm is produced and sent in large quantities. In other words, both men and women will not be able to have children after receiving this COVID-19 vaccine. In fact, the autopsy results of a man who died after receiving this COVID-19 vaccine in Germany have been released. A histological examination of the man's testicles revealed that there were no sperm at all and that the testicles produced spiked whites covered in spikes throughout. If the spike protein enters the ovary, the ovary itself becomes a target for attack by immune cells, killing the cells that will become eggs. In this sense, since 80% of Japanese have received the Covid-19 vaccine, infertility, especially among the generation that is about to have children, will become a serious problem if it is not considered a national problem.



This single image summarizes the process of creating an mRNA vaccine, and if you can understand this diagram, you can understand the problem of DNA contamination in COVID-19 vaccines. The main method for creating mRNA vaccines is to obtain mRNA from plasmid DNA. Plasmid DNA is used because mRNA cannot be suddenly introduced into a vaccine. The circular thing at the left end of the top row is called plasmid DNA. Plasmid DNA is shaped like a ring, but because it is originally DNA, it is made up of two helical strands. Inside this ring, a part is created that becomes the spike protein. In other words, the DNA that makes up the

coronavirus spike protein is included in this circular plasmid DNA. At this stage, mass production becomes possible. From this circular plasmid DNA, only the portion of DNA that will become the spike protein is then excised. However, even at this stage, the cut portion is still DNA. This double-stranded DNA is converted to single-stranded DNA and becomes mRNA. There are many different coronaviruses, so here we cut out just the part that makes up the spike protein and extract that. Without the Spike protein, coronaviruses cannot be produced. Then, by placing the extracted genes into lipid nanoparticles, which are oil particles, a vaccine is created. This means that lipid nanoparticles must contain only the mRNA that makes the spike proteins. However, it was discovered that it contained not only mRNA, but also plasmid DNA.

The Pfizer and Moderna vaccines contained plasmid DNA that shouldn't have been there. It's called an mRNA vaccine because the DNA is cut to create mRNA, and only that mRNA is put into lipid nanoparticles. If these lipid nanoparticles contain circular DNA, they should be called DNA vaccines. In addition, Pfizer's circular plasmid DNA contained an oncogene called SV 40 (simian virus 40). Why is there a cancer gene in the coronavirus vaccine? Additionally, this SV 40 is called the SV 40 promoter and is a gene that is more likely to cause cancer. Because it's a promoter. So why is something like this included? This means that the SV 40 promoter becomes DNA and enters the human gene; if it remains as mRNA, it cannot enter the nucleus of human cells. Thus, the mRNA is reverse transcribed and converted into DNA, which is then incorporated into the cell nucleus. Human cells have a cell nucleus, and within that cell nucleus is DNA. Only DNA can enter the cell nucleus. In other words, the mRNA cannot enter the cell nucleus. However, when the mRNA is reverse transcribed, it is converted into DNA, allowing it to enter the cell nucleus. If you look at this diagram, you will see that DNA is introduced first. This means that it can easily penetrate the nucleus of a human cell. In other words, it is genetic modification. Genetic modification means that DNA, once it enters the nucleus of a human cell, remains there forever until the cell dies. The cancer-causing DNA of SV 40 remains forever in the nucleus of a human cell. The government did not communicate this fact to the people at all. Feedback geben



[P. Moreau, et al. (1981) The SV40 72 base repair repeat has a striking effect on gene expression both in SV40 and other chimeric recombinants. In *Nucleic Acids Research*, **9** (22): 6047-6068]

Author Index

- Adamiv V.T., 8
Arai Yoichi, 108
Ansrushchak A.S., 13
- Ban Henrietta, 32
Buryy O.A., 13
- Danylchenko Pavlo, 58
Dubikovskiy O.V., 16
Dutchak U. M., 8
Dzhagan V.M., 16, 17
Dzhagan V.V., 17
- Gule E.G., 17
- Fedik B., 10
Fedorchuk A.O., 35
Fourman V., 74
- Gal David, 32
Gomonnai A.V., 33
Gomonnai O.O., 33
Guranich P.P., 33
- Haysak Andriy, 32
Huranych P., 33
- Isaieva O.F., 16
Izo T. A., 8
- Kapush O.A., 17
- Kashuba A.I., 35
Koflyuk I. M., 8
Kohut Z.O., 13
Luchechko A. P., 8
- Maksimenko Z.V., 16
Mazur N.V., 17
Medvid I. I., 8
Molnar Alexander, 32
- Piasecki M., 35
- Romanyuk B.M., 16
Rosul R.R., 33
Rudysh M.Ya., 35
- Shchepanskyi P.A., 35
Shulha D.O., 13
- Slivka A.G., 33
Stadnik O.A. , 16
- Teslyuk I. M., 8
Trokhimchuck P., 10, 12, 79
- Valakh M.Ya., 16
Virko S.V., 17
Yefanov V.S., 17
Yukhymchuk V.O., 16, 17
- Андрущак А., 20, 37
Артюх В., 57
Артюх Ю., 81
- Бавдис Михайло, 82
Базилюк В.І., 49
Балабан О.В., 37
Балюк О., 44
Беляєв О.С., 29
Білоус П., 44
Благітко Богдан Ярославович, 101
Блашко Н.М., 39
Болеста Іван, 82, 85
Бондарчук М., 44
Брезвін Р., 54
Булавінець Богдан, 18
Булавінець Тетяна, 18, 19, 22
Булік А. Е., 65
- Валах М.Я., 29
Венгрин Б.Я., 37
Винник Д.М., 37
Вілігурський Олег, 87
Возняк О. , 63
Волошин В. Ю., 42
Ворона І.П., 29
- Галян В.В., 57, 61
Головата О. , 63
Головін Микола, 89
Головіна Н. А., 3
Глухов К. Є. , 42
Грабар О. О., 42
Грабовський Володимир Андрійович, 92
Гудименко О.Й., 29
Гузачов Дмитро, 89
Гулай Любомир Дмитрович, 51
- Давидюк Г. Є., 3

Proceedings RNAOPM-2024
Author Index

- Данилов А.Б., 37
Данильченко Павло Іванович, 97
Дем'янишин Н., 20
- Замуруєва О.В., 44, 49, 63
Захарчук Д. А., 27, 55
- Івановський А.В., 44
Івановський Ю. , 63, 65
Іванюк Д. О., 46
Іващенко І.А., 57
Ільїн Олександр, 22
- Калівошка Богдана, 82
Катерняк Ігор Богданович, 85
Кевшин А. Г., 3, 46, 57, 61
Кевшин Н.А., 61
Кириченко Максим, 47
Кньовець Анастасія Михайлівна, 51
Коваль Ю. В., 27, 55
Когутіч А. А., 42
Когут Юрій Миколайович, 51
Костевич В., 44
Кушнір Олексій, 82
Кушнір О. П., 23
- Ларченко А., 54
Лозінський В.Б., 29
Луньов С. В., 24
- Мазур Т. , 63
Марчук О.В., 39, 47
Мирончук Г. Л., 3, 47
Миронюк Дмитро Мирославович, 101
Мисюк Юрій, 22
Мицик Б., 20
Мицишин Р.В., 104
Муляр В.П., 73
Мягкота С. В., 23
- Набойчик С. С., 49
Найдич Б. , 63
Насека Ю.М., 29
Никируй Л.І., 49, 63
Новосад О., 67
- Павлишин Р. Є., 42
Панасюк Л. І., 24, 27
Піскач Л. В., 46, 51
Приходько А., 69
- Рудиш М., 54
- Савчук Ілля Миколайович, 51
Сахнюк В. Є., 65, 73
Сахнюк П., 63, 65
Семенюк А.А., 61
Семенюк Віталія Олегівна, 52
Сиротюк С.В., 104
Скорубський Д., 65, 71
Смачило Юрій, 22
Стадник В., 54
Стахіра Павло, 18
- Тарасенко А., 81
Темченко В.П., 29
Третьяк І. П., 61
- Федорчук А.О., 39
Федосов С.А., 49, 55
Фітьо Володимир, 19
Фляк А., 44
- Цигика М. В., 42
- Шава Д., 65
Шаправський А., 54
Шваліковський Д., 81
Шигорін О., 67
Шигорін П., 67, 69, 71
Шутовський А.М., 73
- Щепанський П., 54
- Юхимчук В.О., 29
- Яворський Р.С., 49, 63
Яремчук Ірина, 18, 19, 22
Яцинюк Т.К., 57
Яцків Віталій, 19
Ящинський Л. В., 27, 55

Contents

Зміст

Галина МИРОНЧУК, Ніна ГОЛОВІНА, Андрій КЕВШИН. Пам'яті Георгія Євламійовича Давидюка	3
Section 1. The relaxed optical phenomena and processes	
Adamiv V.T., Dutchak U. M., IzoT. A., Teslyuk I. M., Luchechko A. P., Medvid I. I., Koflyuk I. M. LUMINESCENT PROPERTIES OF TRIBORATE GLASS DOPED WITH Ag AND Eu	8
Trokhimchuck Petro, Fedik Bohdan. PHOTON EFFICIENCY: RETROSPECTIVE AND PERSPECTIVE	10
Trokhimchuck Petro. MAIN PECULIARITIES OF THE CREATION AND DEVELOPMENT OF RELAXED OPTICS	12
Section 2. Nonlinear and acoustic optical processes	
O.A. Buryy, D.O. Shulha, Z.O. Kohut, A.S. Ansrushchak. VISUALIZATION OF POSSIBLE MAXIMA OF ACOUSTOOPTICAL AND NON-LINEAR OPTICAL EFFECTS IN CRYSTALS BY EXTREME SURFACES TECHNIQUE	13
O.F. Isaieva, V.M. Dzhagan, V.O. Yukhymchuk, O.A. Stadnik, Z.V. Maksimenko, O.V. Dubikovskiy, B.M. Romanyuk, M.Ya. Valakh. STRUCTURE AND PHASE TRANSITION IN VANADIUM OXIDE THIN FILMS STUDIED BY RAMAN SPECTROSCOPY	16
Mazur N.V., Kapush O.A., Dzhahan V.V., Gule E.G., Yefanov V.S., Virko S.V., Yukhymchuk V.O., Dzhagan V.M. SERS-SUBSTRATES WITH SELF-ENRICHMENT OF ANALYTE IN THE HOT-SPOT	17
Булавінець Богдан, Стахіра Павло, Булавінець Тетяна, Яремчук Ірина ПЛАЗМОННІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОЧАСТИНОК СРІБЛА РІЗНОЇ ГЕОМЕТРІЇ	18
Булавінець Тетяна, Фітьо Володимир, Яцків Віталій, Яремчук Ірина ПЛАЗМОННІ ВЛАСТИВОСТІ МАСИВУ СФЕРИЧНИХ НАНОЧАСТИНОК ЗОЛОТА	19
Н. Дем'янишин, А. Андрущак, Б. Мицик. КРИСТАЛИ З ШЕЄЛІТНОЮ СТРУКТУРОЮ – ПЕРСПЕКТИВНІ АКУСТООПТИЧНІ МАТЕРІАЛИ	20
Ільїн Олександр, Смачило Юрій, Мисюк Юрій, Булавінець Тетяна, Яремчук Ірина. МОДЕЛЮВАННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЕЛІПСОЇДНИХ НАНОЧАСТИНОК ДЛЯ ЗАСТОСУВАННЯ В ПІДСИЛЕНІЙ ПОВЕРХНЕЮ РАМАНІВСЬКІЙ СПЕКТРОСКОПІЇ	22
О. П. Кушнір, С. В. Мягкота. ВИЗНАЧЕННЯ ОПТИЧНИХ КОНСТАНТ І ТОВЩИН ШАРІВ ДВОШАРОВОЇ ІНТЕРФЕРЕНЦІЙНОЇ СТРУКТУРИ	23
Луньов С. В., Панасюк Л. І. ТЕНЗОРЕЗИСТИВНІ ЕФЕКТИ В НЕЙТРОННО-ЛЕГОВАНОМУ КРЕМНІЇ	24
Панасюк Л. І., Коваль Ю. В., Захарчук Д. А., Ящинський Л. В. ДЕФОРМОВАНИЙ РОЗПОДІЛ ДІРОК ПРИ УДАРНІЙ ІОНІЗАЦІЇ ДОМШКИ В ОДНОВІСНО ДЕФОРМОВАНОМУ p-Ge<Ga>	27
В.О. Юхимчук, І.П. Ворона, В.П. Темченко, В.Б. Лозінський, О.Є. Беляєв, М.Я. Валах, Ю.М. Насека, О.Й. Гудименко. ВЛАСТИВОСТІ БІОСУМІСНИХ ПОКРИТТІВ, ОТРИМАНИХ ГАЗОВО-ДЕТОНАЦІЙНИМ ОСАДЖЕННЯМ ГІДРОКСИЛАПАТИТУ НА РІЗНІ ТИПИ ПІДКЛАДОК	29
Section 3 @ 4. New materials for optoelectronics @ Applications of the relaxed and nonlinear optical processes in technology, industry and education	
Henrietta Ban, David Gal, Andriy Haysak, <u>Alexander Molnar</u> . Relaxation processes in layered Cu _{0.15} Fe _{1.7} PS ₃ polycrystals	32

P.P. Guranich, R.R. Rosul, P.Huranych, O.O. Gomonnai, A.V. Gomonnai, A.G. Slivka. Phase transitions in TlInS ₂ layered crystals at high hydrostatic pressure	33
<u>M.Ya. Rudysh</u> , M. Piasecki, A.O. Fedorchuk, P.A. Shchepanskyi, A.I. Kashuba. EXPERIMENTAL AND THEORETICAL STUDY OF THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF Na ₂ SO ₄ CRYSTAL	35
О.В. Балабан, Д.М. Винник, Б.Я. Венгрин, А.Б. Данилов, А.С. Андрущак ЕЛЕКТРОПРОВІДНІ ВЛАСТИВОСТІ Si У ДІАПАЗОНІ ЧАСТОТ 10 ⁻² – 10 ⁶ Гц	37
<u>Блашко Н.М.</u> , Марчук О.В., Федорчук А.О. КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СУЛЬФІДУ Nd ₃ Ag _{0.45} Ga _{1.52} S ₇	39
О. О. Грабар, М. В. Цигика, В. Ю. Волошин, А. А. Когутич, К. Є. Глухов, Р. Є. Павлишин. ФОТОРЕФРАКТИВНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОДВІЙНО ЛЕГОВАНИХ КРИСТАЛІВ ТІОГПОДИФОСФАТУ ОЛОВА	42
Замуруєва О.В., Балюк О., Бондарчук М., Білоус П., Костевич В., Івановський А.В., Фляк А. ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ДЕТЕКТОРИ В РЕТРОСПЕКТИВНІЙ ДОЗИМЕТРІЇ	44
Д. О. Іванюк, Л. В. Піскач, А. Г. Кевшин. ФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛУ Tl ₂ CdSnSe ₄	46
Кириченко Максим, Мирончук Галина, Марчук Олег. Оптичні властивості стекол системи GeS ₂ -As ₂ S ₃	47
Никируй Л.І., Замуруєва О.В., Федосов С.А., Яворський Р.С., Базилюк В.І., Набойчик С. С. ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ СЕНСОРИ В МЕДИЦИНІ	49
Савчук Ілля Миколайович, Семенюк Віталія Олегівна, Кньовець Анастасія Михайлівна, Гулай Любомир Дмитрович, Когут Юрій Миколайович, Піскач Людмила Василівна. ФАЗОВІ РІВНОВАГИ У КВАЗІБІНАРНИХ СИСТЕМАХ AgSb(Vi)S ₂ -Ag ₈ GeS ₆	51
А. Шаправський, Р. Брезвін, В. Стадник, П. Щепанський, А. Ларченко, М. Рудиш. ОПТИКО ЕЛЕКТРОННІ ПАРАМЕТРИ КРИСТАЛІВ (NH ₄) ₃ ZnCl ₅	54
Федосов С.А., Захарчук Д.А., Коваль Ю.В., Ящинський Л.В. ВАХ КРИСТАЛІВ n-CdSb<Te> З РІЗНИМ ВМІСТОМ ЛЕГУЮЧОЇ ДОМІШКИ	55
Яцинюк Т.К., Артюх В., Кевшин А.Г., Іващенко І.А., Галян В.В. ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СТЕКОЛ Ga ₂ S ₃ - GeS ₂ - Sb ₂ S ₃ ЛЕГОВАНИХ Er ³⁺ ТА Nd ³⁺	57
Section 5. Modern problems of theoretical and mathematical physics	
Danylchenko Pavlo. RELATIVISTIC GRAVITHERMODYNAMICS AND STATISTICAL INTERPRETATION OF QUANTUM MECHANICS	58
Кевшин А.Г., Галян В.В., Кевшин Н.А., Семенюк А.А., Третяк І. П. ІСТОРІЯ РОЗВИТКУ ЕЛЕКТРИКИ	61
Мазур Т. , Найдич Б. , Головата О. , Возняк О. , Івановський Ю. , Сахнюк П., Замуруєва О.В., Яворський Р.С., Никируй Л.І. ТЕОРЕТИЧНІ РОЗРАХУНКИ МОДЕЛІ КРИСТАЛІЧНИХ СТРУКТУР Pb _{1-x} Cd _x Te	63
Сахнюк В. Є., Скорубський Д., Івановський Ю.В., Сахнюк П.В., Шава Д., Булік А. Е. МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ ДЖОЗЕФСОНІВСЬКИХ КОНТАКТІВ З ДРУГОЮ ГАРМОНІКОЮ В СТРУМ-ФАЗОВІЙ ЗАЛЕЖНОСТІ	65
Шигорін П., Новосад О., Шигорін О. НАНО-СКВІДИ НА ОСНОВІ БАГАТОШАРОВИХ НАДПРОВІДНИХ КОНТАКТІВ	67
Шигорін П., Приходько А. ДИСПЕРСІЯ ЗВУКОВИХ ХВИЛЬ У ПРОСТОРОВО-ОДНОРІДНОМУ КОНДЕНСОВАНОМУ БОЗЕ-ГАЗІ	69
Шигорін П., Скорубський Д. КВАНТОВЕ ТУНЕЛЮВАННЯ В МАГНІТНОМУ ПОЛІ	71
Шутовський А.М., Сахнюк В.Є., Муляр В.П. СИНГУЛЯРНЕ ІНТЕГРАЛЬНЕ РІВНЯННЯ В ОДНОВИМІРНІЙ ЗАДАЧІ КУЛОНА	73

Section 6. Computer science and its physical applications

Fourman V. COMPUTER SIMULATION OF THE THERMAL MODEL WITH CONVECTION OF THE UPPER MANTLE OF THE EARTH	74
Trokhimchuck Petro P. Some Problems the Creation of Universal Theory the Computer Science	79
Ю. Артюх, А. Тарасенко, Д. Шваліковський. СИМУЛЯЦІЯ РОЗЧИНЕННЯ СОЛЬОВОГО КРИСТАЛУ У ВОДІ	81
Бавдис Михайло, Болеста Іван, Кушнір Олексій, Калівошка Богдана. INFRASTRUCTURE AS CODE: ВИКОРИСТАННЯ TERRAFORM У СИСТЕМІ «НАНОПЛАЗМОНІКА»	82
Болеста Іван Михайлович, Катерняк Ігор Богданович. ПРО ОСОБЛИВОСТІ РОЗВИТКУ НАУКИ ТА ПІДПРИЄМНИЦЬКА ОСВІТА В СУЧАСНОМУ УНІВЕРСИТЕТІ	85
Олег Вілігурський. ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ У ВИВЧЕННІ КУРСІВ ЦИКЛУ COMPUTER SCIENCE: ВИКЛИКИ І МОЖЛИВОСТІ	87
Микола Головін, Дмитро Гузачов. КОМП'ЮТЕРНА МОДЕЛЬ МЕХАНІЧНОГО ШИФРАТОРА ДЖЕФЕРСОНА	89
Грабовський Володимир Андрійович. ЗАСОБИ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ У МЕДИЦИНІ	92
Данильченко Павло Іванович. КОНЦЕПТ «ДЕРБІНГ» – «ВІЛЬНИЙ; СЛУГА; РОБІТНИК; ГОРЯНИ ТА ІНШЕ»	97
Миронюк Дмитро Мирославович, Благітко Богдан Ярославович. МОДЕЛІ ГЛИБИННОГО НАВЧАННЯ ДЛЯ РОЗПІЗНАВАННЯ ЗОБРАЖЕНЬ НА МОБІЛЬНИХ ПЛАТФОРМАХ	101
Сиротюк С.В., Мицишин Р.В. МОДЕЛЮВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ГЕКСАГОНАЛЬНИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛІВ ЗА ДОПОМОГОЮ КОМПЛЕКСУ ПРОГРАМ АВІНІТ	104
Special report	
Yoichi Arai. The COVID-19 vaccine contains the SV40 oncogene	108
Author index	111

Наукове видання

**РЕЛАКСАЦІЙНІ, НЕЛІНІЙНІ, АКУСТООПТИЧНІ ПРОЦЕСИ І
МАТЕРІАЛИ**

Матеріали

**ХІІ міжнародної наукової конференції
Присвяченої пам'яті Георгія Євlampійовича Давидюка
(80-річчю з дня народження)
РНАОПМ'2024**

**RELAXED, NONLINEAR AND ACOUSTIC OPTICAL PROCESSES AND
MATERIALS**

Proceedings

**XII International scientific conference
Dedicated to the memory of Professor Georgy Yevlampievych Davidyuk (on the
80th anniversary of his birth)**

RNAOPM'2024

June 01–04, 2024, Lutsk–Svityaz', UKRAINE

PROCEEDINGS

Друкується в авторській редакції

Формат 60x84 1/16. Обсяг 6,74 ум. друк. арк., 6,23 обл.-вид. арк.
Наклад 300 пр. Зам. 70. Видавець і виготовлювач – Вежа-Друк
(м. Луцьк, вул. Шопена, 12, тел. +38 066 936 25 49).
Свідоцтво Держ. комітету телебачення та радіомовлення України
ДК № 4607 від 30.08.2013 р.



ISBN 978-966-940-568-5



9 789669 405685 >