

**Міжнародна конференція студентів  
і молодих науковців з теоретичної  
та експериментальної фізики  
ЕВРИКА-2023**

**International Conference of Students and  
Young Scientists in Theoretical and  
Experimental Physics  
HEUREKA-2023**

**ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ  
BOOK OF ABSTRACTS**



*16-18 травня 2023 року*

*Львів, Україна*

*May 16-18, 2023*

*Lviv, Ukraine*

Міністерство освіти і науки України  
Львівський національний університет імені Івана Франка  
Фізичний факультет

**Міжнародна конференція студентів  
і молодих науковців з теоретичної та  
експериментальної фізики**

***ЕВРИКА-2023***

*Львів, 16-18 травня*

**ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ**

*Львів-2023*

---

**International Conference of Students and Young  
Researchers in Theoretical and Experimental Physics  
“HEUREKA-2023”**



**Advisory Committee:**

**Stadnyk V.** – Prof., Lviv, Ukraine (Chairman)  
**Bovgyra O.** – Dr., Lviv, Ukraine (Secretary)  
**Voloshinovskii A.** – Prof., Lviv, Ukraine  
**Mudry S.** – Prof., Lviv, Ukraine  
**Tkachuk V.** – Prof., Lviv, Ukraine  
**Kapustianyk V.** – Prof., Lviv, Ukraine  
**Kushnir O.** – Prof., Lviv, Ukraine  
**Melekh B.** – Prof., Lviv, Ukraine  
**Luचेchko A.** – Prof., Lviv, Ukraine  
**Krelowski J.** – Prof., Torun, Poland  
**Andriyevskyy B.** – Prof., Koszalin, Poland  
**Leonski W.** – Prof., Zielona Gora, Poland  
**Rybicki J.** – Prof., Gdansk, Poland  
**Lapinski M.** – Dr., Gdansk, Poland  
**Piasecki M.** – Dr., Częstochowa, Poland  
**Chorniy Yu.** – Dr., Vilnius, Lithuania  
**Gloskovskii A.** – Dr., Hamburg, Germany  
**Stryhanyuk H.** – Dr., Leipzig, Germany  
**Pavlyukh Ya.** – Dr., Halle, Germany  
**Yavorskyi T.** – Dr., Coventry, United Kingdom

**Organizing Committee:**

**Chornodolskyy Ya.** – Dr., Lviv, Ukraine (Chairman)  
**Furgala Yu.** – Dr., Lviv, Ukraine (Co-Chairman)  
**Rudysh M.** – Dr., Lviv, Ukraine (Secretary)  
**Shtablavyi I.** – Dr.Sc., Lviv, Ukraine  
**Velhosh S.** – Dr., Lviv, Ukraine  
**Ftomyn N.** – Dr., Lviv, Ukraine  
**Malyi T.** – Dr., Lviv, Ukraine  
**Shchepanskyi P.** – Dr., Lviv, Ukraine  
**Pryshko I.** – PhD Student, Lviv, Ukraine  
**Kyhym V.** – Student, Lviv, Ukraine  
**Starushenko K.** – Student, Lviv, Ukraine

## СЕКЦІЯ А (МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО)

Особливості структури та спектрального розподілу коефіцієнта поглинання кристалу $\text{Ag}_3\text{SbS}_3$ <i>Денис Мирончук, Андрій Кевшин, Денис Куршель</i> .....	A1
Закономірності змін електрофізичних характеристик кристалів $\text{CsPbBr}_3$ та $\text{CsPbCl}_3$ за дії X-опромінення та електричного поля <i>Юрій Тимків, Роман Лис</i> .....	A2
Синтез та оптичні властивості тонких плівок твердих розчинів заміщення $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ <i>Андрій Кашуба</i> .....	A3
Вплив гібридної суміші на зносостійкість кремнійорганічного в'язучого <i>Олександр Єрмоменко, Анна-Марія Томіна</i> .....	A4
Властивості поверхневих хвиль релея та лява при від'ємному коефіцієнті пуассона ізотропних середовищ <i>Андрій Голубцов, Максим Федорчук, Валентин Кривцов</i> .....	A5
Anomalous magnetoresistance in $\text{Bi}_{95.69}\text{Mn}_{3.69}\text{Fe}_{0.62}$ <i>Valerii Yarovy, Andrii Terekhov, Andrii Solovjov</i> .....	A6
Електропровідність розплавів Sn–Ag–Cu з керамічними наночастинками <i>Віктор Повержук</i> .....	A7
Зміни структури та властивостей порошку Ti-6Al-4V в процесі SLM 3D друку <i>Максим Єфіменко, Максим Цисар, Ілля Клочков, Святослав Мотруніч, Антон Бабак, Ярослав Головенько</i> .....	A8
Electronic properties of the low-temperature phase of $\text{Ag}_8\text{SnS}_6$ crystal <i>Ihor Semkiv, Natalia Kashuba</i> .....	A9
Вплив плакованого металу на показник абразивного стирання ароматичного поліаміду <i>Ярослав Яровий, Катерина Єрмоміна, Євгенія Царьова</i> .....	A10
Дослідження морфології поверхні тонких плівок $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$ <i>Іванна Медвідь, Володимир Бігдай, Марія Процак, Катерина Біляк, Богдан Бордун, Ірина Кофлюк, Віктор Сорокін</i> .....	A11
Analysis of the short-range order in the Al-Co-Sn melts <i>Muratov A.S., Kashyrina Ya.O., Roik O.S.</i> .....	A12
New photovoltaic material - $\text{LiH}_3(\text{SeO}_3)_2$ ferroelectric <i>O. Vira, Yu. Eliyashevskyy, K. Senin, V. Kapustianyk</i> .....	A13
State diagrams of cyclic hydrocarbons <i>V.V. Sagan, V.A. Konstantinov, A.V. Karachevtseva</i> .....	A14
Evolution of optical properties of silicon doped hafnia thin films stimulated by thermal treatment in nitrogen atmosphere <i>D. Khomenkov, S. Ponomaryov, O. Melnichuk, L. Melnichuk, L. Khomenkova, F. Gourbilleau</i> .....	A15
Structural and electrical properties of superionic single crystal and ceramic based $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$ solid solutions <i>I.O. Shender, L.M. Suslikov, A.I. Pogodin, M.J. Filep, T.O. Malakhovska, O.P. Kokhan</i> .....	A16

Поверхневий натяг розплаву Cu-Pb з домішками Ga <i>Роман Овсяник, Степан Мудрий, Роман Білик</i> .....	A17
Магнітний резонанс в гібридних композитах на основі поліфеніленсульфіду <i>Анна-Марія Томіна, Сергій Красновид, Андрій Кончиць</i> .....	A18
Термічна стабільність та магнітоопір нанокompозитів на основі евтектики Ga-In-Sn <i>М. Клепач, І. Штаблавий</i> .....	A19
Моделювання впливу домішки марганцю на властивості кристалів K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> <i>М.Я. Рудий, П.А. Щепанський, Р.С. Брезвін, В.Й. Стадник</i> .....	A20
Дослідження енергетичного спектру дефектів, котрі впливають на поляризаційні процеси у кристалах p-Si <i>Андрій Жигіль, Роман Лис</i> .....	A21
Люмінесценція та центри захоплення носіїв заряду в кристалах твердих розчинів $\beta$ -Ga <sub>1,9</sub> In <sub>0,1</sub> O <sub>3</sub> :0,05%Cr <sup>3+</sup> <i>Маркіян Гащук, Андрій Лучечко, В'ячеслав Васильців</i> .....	A22

### СЕКЦІЯ В (ОПТИКА І СПЕКТРОСКОПІЯ)

Експериментальна установка для дослідження люмінесценції халькогенів в газовому розряді <i>Андрій Генерал</i> .....	B1
Дослідження люмінесценції біомолекул в газовому розряді низького тиску <i>Андрій Генерал, Євген Світличний</i> .....	B2
Comparison of the anisotropic media polarization properties in terms of the homogeneous and multiplicative approach <i>Roman Kurylenko, Ivan Kolomiets</i> .....	B3
Formation of quadruple Gaussian breather optical solitons in diffraction managed nonlinear media: effect of cubic quintic optical nonlinearity <i>Naveen Gupta</i> .....	B4
Про ізотропні точки у кристалах Rb <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> <i>Іван Пришко, Василь Стадник, Назар Фтомин</i> .....	B5
Electron acceleration by laser driven electron plasma wave in plasma with density ramp: cosh gaussian laser beam <i>Rohit Johari and Naveen Gupta</i> .....	B6
Stimulated Raman scattering of self focused laguerre Gaussian laser beams in axially inhomogeneous plasma <i>Alex AK, Naveen Gupta</i> .....	B7
Bose-einstein condensate <i>Anchit Sinha</i> .....	B8
Stimulated Raman scattering of self focused elliptical q-Gaussian laser beam in plasma: effect of density ramp <i>Sanjeev Kumar, Naveen Gupta, S. B. Bhardwaj</i> .....	B9
Frequency doubling of q Gaussian laser beam in plasmas <i>Siddhanth Shishodia &amp; Naveen Gupta</i> .....	B10

Self focusing of laser in plasma: effect of beam intensity on laser beam width <i>Suman Choudhry, Naveen Gupta, S. B. Bhardwaj</i> .....	B11
Волоконно-оптичні джерела лазерного випромінювання як основа протидронної лазерної зброї <i>Євген Світличний</i> .....	B12
Електронна енергетична структура кристалів CsPbCl <sub>3</sub> :Ce <i>Музика Т.М., Ставарський О.В., Чорнодольський Я.М.</i> .....	B13
Оптичні властивості кристалів AgGaGe <sub>3</sub> Se <sub>8</sub> легованих Nd, Dy, Er, Lu <i>Тарас Мельничук, Галина Мирончук</i> .....	B14
Структура та особливості електронного спектру кристала (NH <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> ZnCl <sub>5</sub> <i>А.О. Шаправський, М.Я. Рудиш, Р.С. Брезвін, В.Й. Стадник, П.А. Щепанський</i> .....	B15
Зонна структура кристалів CsPbCl <sub>3</sub> :Cd <i>Підгорний О.О., Кононюк С.О., Чорнодольський Я.М.</i> .....	B16
Рефрактивні параметри кристалів сульфату калію з домішкою мангану <i>Павло Щепанський, Орест Штука, Василь Стадник</i> .....	B17
Гідродинамічні радіуси неоднорідностей водних розчинів сироваткового альбуміну людини в околі характерних концентрацій <i>Наталія Фудулей</i> .....	B18

### СЕКЦІЯ С (НАНОМАТЕРІАЛИ ТА НАНОТЕХНОЛОГІЇ)

Surface rubbing technology for obtaining graphene and two-dimensional materials and structures <i>Levon Misakyan, Areg Shmavonyan, Gagik Shmavonyan</i> .....	C1
Zinc oxide porous plate with micro- and nanoelements as effective photoelectrocatalyst <i>Lilia Hrytsak, Vladyslav Vasil'ev, Taras Kanarskyi, Borys Turko</i> .....	C2
Electroluminescence from oled based on dcm derivative with chemical formula C <sub>25</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> <i>Vladyslav Vasil'yev, Borys Turko, Ivan Karbovnyk, Oleksii Kushnir, Halyna Klym</i> .....	C3
Оптичні властивості біпірамідальних металевих наночастинок <i>Володимир Ніколаєнко, Андрій Коротун</i> .....	C4
Властивості резонансних наноструктур для створення яскравих кольорів <i>Костянтин Оліфір, Андрій Коротун</i> .....	C5
Вплив розмірних ефектів на електричне і магнітне дипольне поглинання електромагнітного випромінювання ансамблем сферичних металевих наночастинок <i>Марина Перепелиця, Андрій Коротун</i> .....	C6
Вплив хіральності на поверхневі плазмони у метал-графеновому нанострижні <i>Олександр Суворов, Ян Карандась, Андрій Коротун</i> .....	C7
Optical properties of nanomaterials based on the Hg <sub>3</sub> Te <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> crystals <i>О.О. Vokotey, О.В. Vokotey, Р.Р. Guranich, А.Г. Slivka</i> .....	C8
Дефектоутворення у квантових точках CdS <i>К.О. Вергелес, В.А. Сминтина, В.М. Скобеєва</i> .....	C9

Optical properties silver's nanofilms	
<i>Anastasiia Huk</i> .....	C10
Дослідження морфології поверхні тонких плівок $(Y_{0.06}Ga_{0.94})_2O_3$ з домішкою Cr	
<i>Іванна Медвідь, Марія Процак, Катерина Біляк, Богдан Бордун, Данило Максимчук, Аліна Мацаєнко</i> .....	C11
Дослідження морфології поверхні тонких плівок $ZnGa_2O_4:Cr$	
<i>Іванна Медвідь, Володимир Бігдай, Марія Процак, Катерина Біляк, Богдан Бордун, Ірина Кофлюк, Віктор Сорокін</i> .....	C12
Influence of the thermal activation mechanism on the thermal conductivity of alicyclic hydrocarbons.	
<i>A. Karachevtseva, V. Konstantinov, V. Sagan</i> .....	C13
Formation of nanostructures on silicon semiconductor surfaces of (110) and (111) orientation	
<i>Mykola Stretovych</i> .....	C14
Synthesis and charge transport characterisation of $WTe_2$ thin films	
<i>Natalia Amirulloieva, Gatis Mozolevskis, Gunta Kunakova</i> .....	C15
Зонна структура кристалів $LiH_3(SeO_3)_2$	
<i>Михайло Онисько, Олег Бовгира, Марія Коваленко</i> .....	C16
Дослідження структури шаруватих плівок $SI/SN/SI$ виготовлених методом термічно-вакуумного осадження	
<i>І. В. Ольховик, В. Б. Неймаш, П. Є. Шепелявий, А. С. Ніколенко, В. В. Стрельчук, В. І. Чегель, С. О. Воронов</i> .....	C17
Electron transport properties of nanosized silver films	
<i>Аропії V., Корлак О.</i> .....	C18
Електроємнісні характеристики вуглецевих матеріалів отриманих із відходів кавової гущі	
<i>С.-В. Склепова, І. Гасюк, Н. Іванічок, Д. Борчук, Б. Рачій</i> .....	C19
Пориста структура вуглецевих матеріалів активованих хлоридом цинку	
<i>А. Солтис, С. Климкович, В. Повх, І. Паневник, А. Глубіцький, О. Винничук</i> .....	C20
Establishment of formation mechanisms for optical and electrophysical properties of nanofilms of CdS	
<i>Valeriya Boshernitsan</i> .....	C21
First principles investigation of sensing properties of single-walled ZnO nanotubes	
<i>Pavlo Tkach, Mariya Kovalenko, Oleg Bovgyra</i> .....	C22
першопринципні дослідження локальної структури, електронних та оптичних властивостей кристалів $Pb[(Mg_{1/3}Nb_{2/3})_xTi_{1-x}]O_3$	
<i>Олег Козаченко, Олег Бовгира, Марія Коваленко</i> .....	C23
	C25

#### СЕКЦІЯ D (КВАНТОВА ТЕОРІЯ, КВАНТОВА ІНФОРМАТИКА)

The role of cluster polarization in the formation and structure of the ${}^6Li$ nuclei	
<i>Nursultan Kalzhigitov, Victor Vasilevsky</i> .....	D1
Знаходження енергії основного стану ангармонічного осцилятора у квантованому	D2

просторі з використанням узагальненого співвідношення невизначеностей <i>Арсен Панас</i> .....	
Властивості високозбуджених резонансних станів у дзеркальних ядрах ${}^9\text{Be}$ та ${}^9\text{B}$ <i>Віктор Жаба, Віктор Василевський, Юлія Лашко</i> .....	D3
Вимірювання заплутаності на квантовому комп'ютері <i>Петро Сапріяничук, Христина Гнатенко</i> .....	D4
Заплутаність спіну $S = 1$ з іншими спінами у графовому стані <i>Колесник Ростислав</i> .....	D5
Застосування моделі потенціалів нульового радіусу до обчислення спектрів нанорозмірних систем <i>Станіслав Кузьмін, Вадим Адамян</i> .....	D6

### СЕКЦІЯ E (ФІЗИКА КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ)

Application of the lattice gas model to the surface tension of molecular fluids <i>Anastasiia Maslechko</i> .....	E1
Залежність діелектричної проникності від густини для простих газів та рідин <i>Вікторія Набуральна</i> .....	E2
Моделювання дзета-потенціалу макромолекул сироваткового альбуміну у водно-солевих розчинах за допомогою коміркової моделі <i>Оксана Столярик, Олексій Хорольський</i> .....	E3
Сегрегація елементів у бінарних плівках під час їх вакуумного відпалювання <i>Тамара Сухова, Сергій Дукаров, Сергій Петрушенко, Олександр Невгасимов</i> .....	E4
Внутрішній розмірний ефект коефіцієнта теплового розширення нанокристалічних плівок срібла <i>Тамара Сухова, Сергій Дукаров, Сергій Петрушенко, Олександр Невгасимов</i> .....	E5
Дзета-потенціал і застійний шар як ключові елементи для побудови теорії електропровідності суспензій наночастинок <i>Світлана Баліка</i> .....	E6
Моделювання процесів кристалізації металевих стекел <i>Тетяна Калініна, Антон Хлебніков, Владислав Бурзаєв, Ірина Комок</i> .....	E7
Умови формування та структура метастабільної модифікації празеодиму <i>Тетяна Дорожка, Роман Бардадим, Катерина Шевелева, Віталія Проноза</i> .....	E8
Prediction about obtaining solid solutions based on the statistical generalized moment <i>A.Sh.Razzokov</i> .....	E9

### СЕКЦІЯ F (АСТРОФІЗИКА ТА АСТРОНОМІЯ)

Дослідження фізичних характеристик та хімічного вмісту волокон крабовидної туманності за допомогою програми <i>diag</i> <i>Улесв Андрій, Гаврилова Наталія</i> .....	F1
Нові аналітичні представлення розв'язків рівняння кеплера і приклади їхнього застосування <i>Д. Дзіковський, М. Ваврух</i> .....	F2



Модифікована ньютонівська динаміка і темна матерія <i>Кигим Владислав</i> .....	F3
Recalculation of the chemical composition of PNE and the radial O/H abundance gradient in the milky way by optimization processing. <i>Myroslav Kasheba, Bohdan Melekh</i> .....	F4
Фотоіонізаційний аналіз хемодинамічних симуляцій еволюцій карликових галактик з активним зореутворенням: порівняння модельних спектрів з даними спостережень <i>Михайло Шевченко, Богдан Мелех</i> .....	F5
Перевизначення вмісту первинного гелію за допомогою моделювання світіння низькометалічних зон II навколо областей неперервного зореутворення. <i>Ігор Кошмак</i> .....	F6
Коректність застосування програми CLOUDY для симуляції еволюції вмісту перших молекул у Всесвіті <i>О. Добра, Б. Мелех</i> .....	F7

### СЕКЦІЯ G (КОМП'ЮТЕРНА ЕЛЕКТРОНІКА ТА ВБУДОВАНІ СИСТЕМИ)

Інтелектуальний кардіограф із багатостадійною діагностикою <i>Володимир Бойко, Любомир Монастирський</i> .....	G1
Розробка модульного вимірювального блоку вакуумного перетворювача ПМТ-2 <i>Danylo Maksymchuk, Mykhailo Ksonzhyk</i> .....	G2
Використання протоколу MQTT для опитування сенсорних мереж в системі "Розумний дім" <i>Тимофій Петруша, Тарас Ляшук</i> .....	G3
Моніторинг якості повітря в системі "Розумний дім" на основі даних сенсорів та прогнозів погоди <i>Тарас Ляшук, Тимофій Петруша</i> .....	G4
Using Kotlin multiplatform technology for creating cross-platform mobile applications <i>Roman Korostenskyi, Igor Olenych</i> .....	G5
Використання однотипних фільтрів у вбудованих системах <i>Т. Ситніков, І. Бадерко, П. Ступень, В. Ситніков</i> .....	G6
Оптимізація моделей для FOG/EDGE-обчислень <i>Ігор Яковенко, Ярослав Бойко, Христина Марущак</i> .....	G7

### СЕКЦІЯ H (МОДЕЛЮВАННЯ ЯВИЩ ТА ПРОЦЕСІВ)

Bifurcations in the complex lorenz model and their impact on the dynamics of traffic flows <i>Oleksii Khomenko, Oleksiy Shikura, Kateryna Khomenko</i> .....	H1
Розв'язання рівнянь математичних моделей динамічних систем методом Дорнмана-Принса зі змінним кроком інтегрування <i>Микола Ангелов, Іван Хвищун</i> .....	H2

### СЕКЦІЯ І (СИСТЕМИ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ТА АНАЛІЗ ДАНИХ)

Аналіз LArTPC даних з використанням методів машинного навчання <i>Фалько Андрій, Руслан Єрмоленко, Ольга Гогота</i> .....	I1
Aggression detection of text using machine learning algorithms <i>Marianna Prytula, Oleh Sinkevych, Igor Olenych</i> .....	I2
Using neural network variational montecarlo for ground state energy prediction <i>Mykhailo Moroz, Oleg Bovgyra</i> .....	I3
Text embeddings for fake news classification <i>Oleksiy Khatar, Ihor Olenych, Oleh Sinkevych</i> .....	I4
Мобільний додаток для суддівства тенісного матчу з використанням мікросервісної архітектури та сервісів Azure <i>Дзюрах Іван, Клим Галина</i> .....	I5
Parallel implementation of ABC and PSO SWARM algorithms <i>Oleh Sinkevych, Yaroslav Boyko, Bohdan Sokolovskii, Mykhailo Pavlyk</i> .....	I6
Застосування згорткової нейронної мережі для визначення висоти тріщин по сигналам ультразвукового контролю <i>Софія Снівак, Руслан Єрмоленко</i> .....	I7
Air quality forecasting using machine learning <i>Volodymyr Hura</i> .....	I8
Система обміну інформаційних матеріалів між користувачами на базі веб-сайту <i>Максим Винницький, Галина Клим</i> .....	I9
Геоінформаційна система відеоспостереження на основі регіональних географічних та GPS даних <i>Руслан Гетьман, Галина Клим</i> .....	I10
Мобільний додаток для створення схем вишивки бісером <i>Катерина Кондрак, Галина Клим</i> .....	I11
Веб-застосунок для студентських петицій <i>Роман Косенко, Галина Клим</i> .....	I12
Автоматизована інформаційна система обліку товару у логістичній компанії <i>Ігор Кузьма, Галина Клим</i> .....	I13
Система економії теплової енергії у квартирі <i>Тарас Терендій, Галина Клим</i> .....	I14
Спеціалізований веб-сайт для продажу товарів та обліку продукції <i>Андрій Шпак, Галина Клим</i> .....	I15
Інформаційна система для приготування страв за кулінарними рецептами <i>Максим Урин, Галина Клим</i> .....	I16





**СЕКЦІЯ А**

***МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО***

**SECTION A**

***MATERIALS SCIENCE***



# ОСОБЛИВОСТІ СТРУКТУРИ ТА СПЕКТРАЛЬНОГО РОЗПОДІЛУ КОЕФІЦІЄНТА ПОГЛИНАННЯ КРИСТАЛУ $\text{Ag}_3\text{SbS}_3$

**Денис Мирончук, Андрій Кевшин, Денис Куршель**

Волинський національний університет ім. Лесі Українки, просп. Волі 13,  
Луцьк, 43025, Україна

[masloamaxaslo9@gmail.com](mailto:masloamaxaslo9@gmail.com), [Kevshin\\_A@ukr.net](mailto:Kevshin_A@ukr.net), [gud\\_vichy@ukr.net](mailto:gud_vichy@ukr.net)

Сьогодні особливо актуальними є дослідження халькогенідних багатокомпонентних напівпровідникових кристалів у зв'язку з великою різноманітністю їх фізичних властивостей: оптичних, електричних, п'єзо- і сегнетоелектричних і т.д. Це сприяє широкому їхньому застосуванню як у наукових, так і прикладних цілях. Особливо важливим є розуміння особливостей структурних складових досліджуваних сполук, що дозволяє проектувати матеріали із різними наперед заданими властивостями. До таких перспективних напівпровідникових сполук належить кристал  $\text{Ag}_3\text{SbS}_3$ .

Розрахунки показують, що кристал  $\text{Ag}_3\text{SbS}_3$  кристалізується в тригональній структурі із 42 іонами на комірку, з трьома типами атомів, числом формульних одиниць  $Z = 6$ . Дана сполука має просторову групу симетрії № 161 ( $C_{3v}^6$ ), кристалічний клас  $3m$ . Кристалічну структуру сполук  $\text{Ag}_3\text{SbS}_3$  можна представити як укладання порожніх поліедрів  $\text{SbS}_3$ , де міжатомні віддалі S – S в межах поліедрів значно скорочені по відношенню до алогічних віддалей між атомами з сусідніх поліедрів. В структурі сполуки  $\text{Ag}_3\text{SbS}_3$ ,  $hR42,161$  атоми срібла мають найближче координаційне оточення з атомів сірки у вигляді октаедра та тетрагональної піраміди з іонів  $\text{SbS}_3^{3-}$  в межах другого координаційного оточення.

Для оцінки ширини забороненої зони ( $E_g$ ) кристала  $\text{Ag}_3\text{SbS}_3$  було проведено вимірювання спектрального розподілу коефіцієнта оптичного поглинання  $\alpha(h\nu)$  при кімнатній температурі біля краю фундаментального поглинання.

Величина забороненої зони визначалась екстраполяцією лінійної залежності енергії фотона до перетину з віссю абсцис. Як показали розрахунки, ширина забороненої зони кристала виявилася рівною 1,91 eV при 300 K, що добре узгоджується з іншими експериментальними даними по дослідженню даної сполуки. Зокрема, у роботах [1, 2] вказано, що  $\text{Ag}_3\text{SbS}_3$  є напівпровідником р-типу з шириною забороненої зони 1,77–2,0 eV.

[1] M. Gusain, P. Rawat, R. Nagarajan, Soft chemical synthesis of  $\text{Ag}_3\text{SbS}_3$  with efficient and recyclable visible light photocatalytic properties, *Materials Research Bulletin* (2014), V. 60, p. 872.

[2] A.M. Meléndez, R. Arroyo, I. González, On the Reactivity of Sulfosalts in Cyanide Aqueous Media: Structural, Bonding and Electronic Aspects, *ChemPhysChem* (2010), V. 11, 2879.



## ЗАКОНОМІРНОСТІ ЗМІН ЕЛЕКТРОФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРИСТАЛІВ $\text{CsPbBr}_3$ ТА $\text{CsPbCl}_3$ ЗА ДІЇ Х-ОПРОМІНЕННЯ ТА ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ

**Юрій Тимків, Роман Лис**

Львівський національний університет імені Івана Франка,  
кафедра сенсорної та напівпровідникової електроніки,  
вул. Тарнавського, 107. Львів 79017, Україна.  
E-mail: y.tymkiv.official@gmail.com

Однією з важливих задач сучасної науки є пошук нових матеріалів для сонячних батарей, з метою покращення ефективності та зниження витрат виробництва. Кристали  $\text{CsPbCl}_3$  та  $\text{CsPbBr}_3$  відносяться до структур, що мають кубічну ґратку та складаються з іонів свинцю та галогенів. Ці кристали мають великий потенціал у сфері оптоелектроніки, оскільки вони проявляють перспективні оптичні властивості, такі як високу фоточутливість та фотостійкість.

Дослідження в області радіаційно-стимульованих змін в кристалах  $\text{CsPbCl}_3$  та  $\text{CsPbBr}_3$  демонструють, що вони можуть проявляти різні відповіді на випромінювання в залежності від їх структури та складу. Наприклад, дослідження виявили, що випромінювання може призводити до зменшення довжини зв'язку між іонами свинцю та галогенів у кристалах  $\text{CsPbCl}_3$ , що може призводити до зміни їх кристалічної структури та оптичних властивостей.

Було проведено дослід над кристалом  $\text{CsPbBr}_3$  за результатами якого було виявлено, що тривала дія напруги на кристал призвела до його забарвлення та збільшення опору. Кристал мав видиме потемніння з боку катода, яке поширювалося всередину кристалу і після продовження експерименту, потемніння простягнулося на всю довжину кристалу.

Поява змін в кристалі може бути пов'язана зі зміною структури матеріалу під впливом електричного поля. Відомо, що електричне поле може впливати на положення та рух іонів у кристалі, що може призвести до зміни електричних та оптичних властивостей матеріалу. Збільшення опору кристалу, що було виявлено в експерименті, може бути пов'язане зі зміною концентрації носіїв заряду у кристалі.

Таким чином, дослідження демонструє можливість впливу електричного поля на кристали та зміни їх оптичних та електричних властивостей. Такі зміни можуть мати важливі наслідки для розробки нових оптоелектронних пристроїв та матеріалів.



## СИНТЕЗ ТА ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ТОНКИХ ПЛІВОК ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ ЗАМІЩЕННЯ $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$

Андрій Кашуба

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

Плівки  $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$  осаджували на кварцові та кремнієві підкладки розміром  $16 \times 8 \times 1,1 \text{ мм}^3$  методом височастотного (ВЧ) магнетронного напилення (13,6 МГц) за допомогою вакуумної станції ВУП-5М (Selmi, Україна). Відстань мішень–підкладка становила 60 мм. Початок і кінець процесу контролювали за допомогою рухомого затвора. Тиск газу всередині камери становив  $4 \times 10^{-4}$  Па. Осадження плівок проводили за тиску аргону (Ar) в діапазоні 1,0–1,3 Па. Потужність ВЧ магнетрона підтримували на рівні 100 Вт, а температуру підкладки  $\sim 600$  К. Для нагріву підкладок використовували, високотемпературний вольфрамовий нагрівач потужністю 300 Вт. Температуру контролювали за допомогою пропорційно-інтегрально-похідного (PID) регулятора для керування швидкостями нагрівання та охолодження, а також для забезпечення температурних умов осадження.

Фазовий аналіз і уточнення кристалічної структури проводилось за даними рентгенівської дифракції (XRD, DRON-2.0M) при кімнатній температурі. Товщину плівок також вимірювали на профілометрі Veeco (модель Dektak 8). Середнє значення товщини плівок  $\text{CdSe}_{1-x}\text{Se}_x$  становить  $\sim 0,5$  мкм. Для аналізу хімічного складу матеріалів використовували рентгенівську флуоресцентну спектроскопію (XRF) та енергодисперсійний рентгенівський аналіз (EDX). Спектральна залежність оптичного пропускання отриманих зразків у видимій та близькій інфрачервоній областях досліджувалась при кімнатній температурі з використанням спектрометра Shimadzu UV-3600.

Спектри XRF показують, що в зразках Cd-Se-S відсутні будь-які домішки. Виявлено незначне відхилення компонентного співвідношення від теоретично очікуваного. За результатами XRD встановлено, що тонкі плівки  $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$  ( $x=0-1$ ) кристалізуються в структурі вюртцит. З метою встановлення компонентного розподілу та якості синтезованих сполук було проведено дослідження морфології поверхні твердих розчинів  $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ /кремній. За результатами аналізу поверхні було встановлено, що компонентний розподіл на поверхні є рівномірним. На основі спектрів пропускання було встановлено інтегральну величину пропускання, оптичну ширину забороненої зони та величину спін-орбітального розщеплення. Для визначення оптичної ширини забороненої зони тонких плівок було використано координати Тауца. Встановлено, що значення оптичної ширини забороненої зони нелінійно зростає з вмістом сульфуру ( $x$ ) та може бути описана параболічною залежністю. Величина ширини забороненої зони тонких плівок  $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$  змінюється в межах від  $\sim 1,68$  eV ( $x=0$ , CdSe) до  $\sim 2,39$  eV ( $x=1$ , CdS). Також, на основі концентраційної залежності оптичної ширини забороненої зони встановлено значення параметра прогину ( $\delta$ ).



## ВПЛИВ ГІБРИДНОЇ СУМІШІ НА ЗНОСОСТІЙКІСТЬ КРЕМНІЙОРГАНІЧНОГО В'ЯЖУЧОГО

Олександр Єрмоєнко, Анна-Марія Томіна

Дніпровський державний технічний університет, вул. Дніпробудівська 2,  
[an.mtomina@gmail.com](mailto:an.mtomina@gmail.com)

Серійні підшипники кочення вузлів тертя металургійної та харчової промисловості, що містять як антифрикційний заповнювач (АФЗ) пластичний змащувальний матеріал (літол, солідол тощо) під впливом високих температур в процесі експлуатації коксуються. Внаслідок чого підприємства несуть економічні збитки, що пов'язані з простоем та ремонтом техніки, оскільки подальша його стабільна експлуатація без повного розбору вузла тертя та введення додаткового змащення стає не можливою. Рішенням даної проблеми є використання АФЗ на полімерній основі. Сьогодні набувають популярності гібридні полімерні композиційні матеріали, що містять як наповнювач суміш волокнистих і порошкових наповнювачів. Волокна забезпечують міцність і стійкість до впливу навантажень, а порошкові наповнювачі ефект «самозмащення». Враховуючи зазначене, розробка нових зносостійких АФЗ є актуальною задачею сучасного матеріалознавства.

Як полімерна матриця для створення АФЗ був обраний кремнійорганічний каучук (КО). Для наповнення кремнійорганічного в'язучого обрали суміш базальтового волокна (БВ) та прихованокристалічного графіту (ГЛС). Приготування гібридних композитів на основі кремнійорганічного полімеру, що містять суміш дискретного базальтового волокна та прихованокристалічного графіту (склади наведені і табл.), здійснювали у горизонтальному змішувачі з подальшим термореактивним зшиванням полімерної матриці при температурі 393 К протягом 30 хвилин. Зносостійкість АФЗ за схемою «диск-колодка» досліджували на машині тертя СМЦ-2, в умовах тертя без змащення, при навантаженні 1,0 МПа, швидкості ковзання 1,0 м/с. Як контртіло використовували сталь 45 (45-48 HRC,  $R_a=0,32$  мкм). Температуру в зоні контакту фіксували за допомогою термопарного термометру ET-939, при цьому термопару розташовували в зразку на відстані 0,3 мм від поверхні контакту з сталевим контртілом.

Встановлено, що найбільшим показником зносостійкості характеризується гібридний композит під №4 (див. табл). Це можна пояснити тим, що в процесі експерименту на сталевому контртілі зі зростанням вмісту ГЛС чітко спостерігалось зростання «антифрикційного шару», що в свою чергу призводить до зменшення сил тертя між контртілом та зразком. Підтвердженням сказаного є зменшення температури в зоні контакту в середньому на 20 градусів.

Таблиця. Функціональні властивості АФЗ

№	Склад композитів, мас.%			Інтенсивність лінійного зношування, $I_n \cdot 10^{-8}$	Температура в зоні контакту, К
	КО	БВ	ГЛС		
1	60	20	20	80,00	358
2	50	25	25	15,70	353
3	40	30	30	4,80	350
4	30	35	35	4,63	339





## ВЛАСТИВОСТІ ПОВЕРХНЕВИХ ХВИЛЬ РЕЛЕЯ ТА ЛЯВА ПРИ ВІД'ЄМНОМУ КОЕФІЦІЄНТІ ПУАССОНА ІЗОТРОПНИХ СЕРЕДОВИЩ

**Андрій Голубцов, Максим Федорчук, Валентин Кривцов**

Рівненський державний гуманітарний університет,  
вул. Ст. Бандери, 12, 33028 Рівне, valentyn.krivtsov@rshu.edu.ua

Теоретичні викладки класичної теорії пружності ізотропних середовищ зазвичай обмежуються випадками додатних коефіцієнтів Пуассона ( $\nu$ ), незважаючи на те, що термодинамічно допустимий інтервал його зміни включає в себе і область від'ємних значень. Встановлено, що для багатьох ізотропних матеріалів і ряду кристалів коефіцієнт Пуассона може мати від'ємні значення [1, 2].

Спираючись на аналіз розмірностей, можна оцінити вплив коефіцієнта Пуассона у всьому діапазоні його зміни на швидкості пружних хвиль для ряду задач теорії ізотропної пружності, зокрема, задачі про поверхневі хвилі Релея.

Дослідження відносних безрозмірних розподілів зміщень і напружень у хвилях Релея при додатних і від'ємних коефіцієнтах Пуассона виконувалися і раніше, однак попередній аналіз впливу коефіцієнта Пуассона на розподіл зміщень і напружень не можна вважати завершеним, оскільки вибрані характеристики змінюються зі зміною величини  $\nu$ .

Тому метою даної роботи став аналіз поведінки хвиль Релея у середовищах поширення з різними коефіцієнтами Пуассона з врахуванням його відносного впливу при фіксованому значенні величини  $\nu$ . Аналогічний аналіз проведено для відносних розподілів зміщень і напружень у першої моди зсувних хвиль Лява в ізотропних середовищах.

Результати проведених досліджень дають можливість зробити наступні загальні висновки у контексті поставлених у роботі завдань.

Поведінка хвиль Релея і Лява напівпростору є сильно залежною як від коефіцієнта Пуассона у першому випадку, так і від двох коефіцієнтів Пуассона для поверхневого шару і нижнього напівпростору в другому випадку.

Від'ємні значення коефіцієнтів Пуассона матеріалів, на поверхні яких поширюються хвилі Релея і Лява, суттєво впливають на швидкості поширення, амплітуди та ступені проникнення хвиль в об'єм.

При достатньо великих за модулем від'ємних значеннях коефіцієнта Пуассона має місце сильне зростання максимальних напружень у приповерхневих областях для хвиль обох типів.

Матеріальні частинки у хвилях Релея обертаються за еліптичними траєкторіями у протилежних напрямках на великій і малій глибині від вільної поверхні. Хвилі є лінійно поляризованими на деякій проміжній глибині.

Ступінь проникнення поперечних хвиль Лява у напівпростір, який вкрито шаром іншого матеріалу, залежить від товщини поверхневого шару, коефіцієнта Пуассона і модулів Юнга обох матеріалів.

[1] R.S. Lakes, Science, **4792**, 1038 (1987).

[2] T.-C.Lim, P. Cheang, F. Scarpa, Phys. Status Solidi. **251**, 388 (2013).

**ANOMALOUS MAGNETORESISTANCE IN  $\text{Bi}_{95.69}\text{Mn}_{3.69}\text{Fe}_{0.62}$** **Valerii Yarovyi<sup>1</sup>, Andrii Terekhov<sup>1,2</sup>, Andrii Solovjov<sup>1,2</sup>**<sup>1</sup>B.Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of NAS of Ukraine, 47 Nauky Ave., Kharkiv, 61103, Ukraine<sup>2</sup>Institute for Low Temperatures and Structure Research, Polish Academy of Sciences, P.O. Box 1410, 50-950 Wroclaw, Poland  
e-mail: yarovyi@ilt.kharkov.ua

Bi-Mn solid solutions are interesting due to their high coercive force at room temperature. With increasing temperature, it grows to values exceeding the coercive forces of rare-earth permanent magnets [1, 2]. At the same time, it is noteworthy that in spite of numerous studies on the magnetic properties of Bi-Mn solid solutions, the study of electrical transport behavior has been almost never conducted. Our group has recently observed colossal positive anisotropic magnetoresistance and anomalies on the temperature dependence of electric resistance in magnetic field in a  $\text{Bi}_{95.69}\text{Mn}_{3.69}\text{Fe}_{0.62}$ , for the first time [3, 4]. A detailed study of the magnetoresistance behavior in magnetic fields at various temperatures in Bi-Mn solid solutions can help to reveal mechanisms responsible for anomalous behavior of magnetoresistance in the investigated material.

In this work we measured electrical resistivity in magnetic fields up to 14 Tesla at 5 K, 80 K, 150 K and 300 K, plotted the field dependences of magnetoresistance for configurations  $\mathbf{H} // \mathbf{I}$  and  $\mathbf{H} \perp \mathbf{I}$  and compared them with the ones in pure bismuth. This comparison is reasonable because our sample is a bismuth matrix with  $\alpha$ -BiMn magnetic phase inclusions [4] and the conductivity is due to current flowing through the bismuth matrix, which is influenced by  $\alpha$ -BiMn magnetic phase uniformly distributed over the sample volume. Detailed analysis of the magnetoresistance  $MR = ([\rho(H) - \rho(0)]/\rho(0)) * 100\%$  showed that the maximum  $MR$  values are  $\approx 4379\%$  for  $\mathbf{H} \perp \mathbf{I}$  and  $\approx 863\%$  for  $\mathbf{H} // \mathbf{I}$  in field 14 Tesla. It was found that the dependences  $MR(H)$  differ significantly from the magneto-field ones of magnetoresistance for pure bismuth. It has assumed that the main factor leading to the anomalous behavior of the magnetoresistance in  $\text{Bi}_{95.69}\text{Mn}_{3.69}\text{Fe}_{0.62}$  is the influence of the internal magnetism of inclusions of the  $\alpha$ -BiMn phase on the behavior of charge carriers (electrons and holes) in the bismuth matrix.

- [1] Yong-Sheng Liu, Jin-Cang Zhang, Zhong-Ming Ren, Min-An Gu, Jing-Jing Yang, Shi-Xun Cao, and Zheng-Long Yang, Chin. Phys. Lett. **27**, 097502-1 (2010). DOI:10.1088/0256-307X/27/9/097502
- [2] N.V. Rama Rao, A.M. Gabay, and G.C. Hadjipanayis, J. Phys. D: Appl. Phys. **46**, 062001-1 (2013). <https://doi.org/10.1088/0022-3727/46/6/062001>
- [3] A.V. Terekhov, A.L. Solovjov, A. I. Prokhvatilov, A. I., V.V. Meleshko, I.V. Zolochevskii, J. Cwik, A. Los, A.D. Shevchenko, O.M. Ivasishin, and Z.D. Kovalyuk, East European Journal of Physics, **4**, 12 (2017). DOI:10.26565/2312-4334-2017-4-02
- [4] A.V. Terekhov, K. Rogacki, A.L. Solovjov, A N. Bludov, A.I. Prokhvatilov, V.V. Meleshko, I.V. Zolochevskii, E.V. Khristenko, J. Cwik, A. Los, A.D. Shevchenko, Z.D. Kovalyuk, and O.M. Ivasishin, Low Temperature Physics, **44**, 1153 (2018). <https://doi.org/10.1063/1.5060969>



## ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ РОЗПЛАВІВ Sn–Ag–Cu З КЕРАМІЧНИМИ НАНОЧАСТИНКАМИ

**Віктор Повержук**

Львівський національний університет імені Івана Франка

вул. Кирила і Мефодія, 8, 79005 Львів, Україна

e-mail: [viktor.poverzhuk@lnu.edu.ua](mailto:viktor.poverzhuk@lnu.edu.ua)

Сплави системи Sn–Pb тривалий час були основними матеріалами для створення припоїв через прийнятні теплофізичні і механічні властивості та невисоку вартість. Проте токсичний свинець має негативний вплив як на людський організм, так і на навколишнє середовище. ЄС на законодавчому рівні заборонив використання таких припоїв, що започаткувало розвиток безсвинцевих припоїв. Одними з найбільш перспективних матеріалів є сплави системи Sn–Ag–Cu з переважаючим вмістом олова. Серед методів покращення властивостей таких припоїв є введення в матрицю базового матеріалу наночастинок (НЧ), керування вмістом яких приводить до покращення фізико-хімічних параметрів.

Метою цього дослідження було встановити зміну електропровідності базових сплавів  $\text{Sn}_{94,56}\text{Ag}_{4,14}\text{Cu}_{1,29}$  системи SAC при додаванні до них НЧ  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$  та  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , вміст яких у зразках становив 0,5 мас.%. Вимірювання проводили за допомогою чотириточкового методу під час нагрівання та охолодження в інтервалі температур від кімнатної до приблизно 650 К.

У результаті встановлено залежності електропровідності від температури  $\sigma(T)$  сплавів з НЧ в твердому та рідкому станах. Проведені вимірювання в режимах нагрівання та охолодження протягом декількох циклів з різною швидкістю показали, що швидкість нагрівання і охолодження помітно не впливала на поведінку електропровідності. Додавання таких НЧ знижує абсолютні значення електропровідності базового сплаву, однак, при невеликій кількості (до 1 мас.%) ці зміни не є суттєвими. Додавання керамічних домішок приводить до зменшення електропровідності за рахунок додаткових центрів розсіювання електронів. За результатами електропровідності визначено температури плавлення і кристалізації досліджених сплавів.



## ЗМІНИ СТРУКТУРИ ТА ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОРОШКУ Ti-6Al-4V В ПРОЦЕСІ SLM 3D ДРУКУ

**Максим Єфіменко<sup>1</sup>, Максим Цисар<sup>2</sup>, Ілля Клочков<sup>2</sup>, Святослав  
Мотруніч<sup>2</sup>, Антон Бабак<sup>2</sup>, Ярослав Головенько<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Національний технічний університет України "КПІ ім. Сікорського",  
пр. Перемоги, 37, Київ, 03056, Україна, e-mail  
[maks.efimenko.9925@gmail.com](mailto:maks.efimenko.9925@gmail.com)

<sup>2</sup> Інститут електрозварювання імені Є. О. Патона НАН України,  
вул. Казимира Малевича, 11, м. Київ, 03150, Україна

Низька теплопровідність 21.9Вт/м·К, висока теплоємність 530.8Дж/кг·°С, низка питома густина 4,505г/см<sup>3</sup> при високій твердості НВ 175МПа та границі міцності при розтязі до 700МПа, роблять титан та сплави на його основі дуже привабливим для космічного, авіа будівництва та машинобудування. Висока інертність таких сплавів та біосумісність розширює цю сферу на: хімічну, електроенергетичну та медичну галузі.

Однак є ряд проблем. Так при виготовленні деталей складної форми з титану різанням до 90% йде у брухт [1]. З метою зниження собівартості в США було запущено програму buy-to-fly, для зменшенні співвідношення 9:1 придбаного металу до маси кінцевої деталі до 5:1 [2]. Лиття також не дає змогу знизити собівартість зачастин. Титан дуже активний і хімічно взаємодіє з атмосферними газами та матеріалами ливарних тиглів [3]. Плавлення здійснюється в аргоновій атмосфері спрямованим променем, таким чином, щоб залишався шар твердого титану між тиглем і розплавом.

Всі ці фактори сприяли виникненню новітніх технологій виробництва з титану та його сплавів, а саме SLM та SLS 3D друку, плавлення титанового сплаву здійснюється лазерним променем в середовищі аргону. Вихідний порошок Ti-6Al-4V отримують за технологією газової атомізації [4]. Сама технологія виробництва такого порошку дає змогу уникнути забруднення вихідної сировини газами з атмосфери [5].

Відходи такого виробництва менші, оскільки порошок після гравітаційного просіву використовують повторно. Однак високі температури, контакт із стінками камери, трубопроводу та системою відсіву, залишки атмосфери призводить до поступової деградації порошку Ti-6Al-4V, підвищення вмісту кисню з 0.13 до 0.3%, азоту з 0.03 до 0.1%, водню з 0.012 до 0.2%. За рахунок температурного впливу відбуваються незворотні фазові переходи  $\alpha$ -Ti в  $\beta$ -Ti. Знижується питома щільності з 4500 до 4492кг/м<sup>3</sup>. Зменшується текучість порошку з 2.04 до 2.18с. За рахунок розтріскування часток під впливом температури збільшується питома поверхня з 1,4819 до 1,5180м<sup>2</sup>/г. Що призводить до збільшення пористості та зниження механічних характеристик готових виробів.

[1] G. Lutjering, J.C. Williams: Titanium. Springer-Verlag, Berlin (2003), p.34.

[2] J.E. Barnes, W. Peter and C.A. Blue, Mater. Sci. Forum **618**, (2009), pp.165-168.

[3] DuPont, Metal Powder Report **61**, (2006), p.4.

[4] C.G. McCracken, C. Motchenbacher, D.P. Barbis, Int J Powder Metall. **46(5)**, (2010), pp.19-26.

[5] M.A. Imam, F.H. Forest, JOM, **62**, (2010), pp.15-16.



## ELECTRONIC PROPERTIES OF THE LOW-TEMPERATURE PHASE OF $\text{Ag}_8\text{SnS}_6$ CRYSTAL

**Ihor Semkiv, Natalia Kashuba**

Lviv Polytechnic National University, Bandera Str. 12, Lviv, Ukraine, 79013

\*e-mail: [ihor.v.semkiv@lpnu.ua](mailto:ihor.v.semkiv@lpnu.ua)

The  $\text{Ag}_8\text{SnS}_6$  crystal has been synthesized and its crystal structure has been studied by X-ray diffraction. The lattice parameters  $a=15.298(3)$  Å,  $b=7.552(2)$  Å,  $c=10.719(3)$  Å,  $V=1238.6(3)$  Å<sup>3</sup>, orthorhombic structure  $Pna2_1$  space group (No. 33) for  $\alpha''$ - $\text{Ag}_8\text{SnS}_6$  crystal have been refined and show a good correlation with known literature data.

Theoretical calculations were performed by density functional theory (DFT) to calculate the electron band structure of  $\alpha''$ - $\text{Ag}_8\text{SnS}_6$  using the crystal structure and lattice parameters which were obtained from XRD data at room temperature. To describe the exchange-correlation energy of the electronic subsystem, functional in the approximation of local density (LDA) and generalized gradient (GGA) was used. For GGA calculation was used two parameterizations of the Purdue–Burke–Ernzerhof (PBE and PBEsol – for solids).

The GGA+PBE method has a higher correlation of obtained value of the bandgap with experimental data. It has been established that the smallest bandgap is localized at the center of the BZ (i.e., at the point  $\Gamma$ ). Therefore, our argyrodite should reveal direct optical transitions. The direct-bandgap transition (localized at the point  $\Gamma$  of the BZ) can be formed by the Ag–S links. Also, there is a clear anisotropy difference  $E(\mathbf{k})$  between the valence and conduction bands. The valence complex top is flatter, which is explained by the fact that holes are less mobile than electrons. This behavior is caused by the inverse relationship between the effective mass ( $m^*$ ) of the electron ( $m_e^*$ )/hole ( $m_h^*$ ) and the spread  $E(\mathbf{k})$  of energy levels. The maximum dispersion of valence and conduction bands observed for  $\Gamma \rightarrow Z$  direction (the same situation in  $Y \rightarrow T$  direction). The absolute value of the effective mass of the electron ( $\sim 0.8m_0$ ) and hole ( $\sim 6m_0$ ) was calculated based on the results of the electronic structure.

The band structure is characterized by the relatively high hybridization of electronic states in the energy ranges close to the energy gap  $E_g$ . The lowest energy bands lying in the range from  $-14$  to  $-12$  eV are formed by  $s$ -electronic states of S. The formation of subsequent bands that are spread from  $-7$  to  $-6$  eV and the energy marker comes from the contribution of the  $s$ -electronic states of Sn. The top of the valence band is composed of the  $d$ -electronic states of Ag, with some ‘admixture’ of the  $p$ -electronic states of Ag and S. On the other hand, the bottom of the conduction band is mainly composed of the  $s$ - and  $p$ -electronic states of Ag.



## ВПЛИВ ПЛАКОВАНОГО МЕТАЛУ НА ПОКАЗНИК АБРАЗИВНОГО СТИРАННЯ АРОМАТИЧНОГО ПОЛІАМІДУ

**Ярослав Яровий, Катерина Єр'оміна, Євгенія Царьова**

Дніпровський державний технічний університет, вул. Дніпробудівська 2,  
eka.yeriomina@gmail.com

Полімерні композиційні матеріали є перспективною альтернативою металам при виготовленні деталей конструкційного та триботехнічного призначення для аерокосмічної, енергетичної, електричної, сільськогосподарської та автомобільної промисловості. Використання полімерних композитів дозволяє отримати вироби на 80% легші і стабільною роботою в екстремальних умовах, високими показниками зносостійкості та міцності. Одними з розповсюджених наповнювачів для створення багатофункціональних металополімерів є метали: нікель, кобальт, срібло, європій, хром, мідь. Вироби з металополімерів характеризуються високими показниками електро- та теплопровідності, ударо- та зносостійкості в поєднанні з відмінними фізико-хімічними, магнітними та оптичними властивостями. Враховуючи зазначене, пошук нових матеріалів, у тому числі металополімерів, із високим показником абразивної зносостійкості, які дозволять підвищити працездатність вузлів тертя сучасної техніки, є актуальним.

Для виготовлення металополімерів як полімерну матрицю обрано ароматичний поліамід фенілон марки С-2 (дисперсність 20–40 мкм), що характеризується широким температурним інтервалом експлуатації (153–553 К) та стабільністю роботи під впливом багатьох агресивних середовищ. Як наповнювач обрали дисперсний (середній розмір часток 40–100 мкм) порошок сплаву ПКХН-15 на основі карбіду хрому плакованого 15% нікелю. Приготування металополімерів здійснювали методом компресійного пресування. Мікротвердість на межі поділу «полімер-наповнювач» визначали за допомогою приладу ПМТ-3М. Дослідження абразивної зносостійкості зразків проводили жорсткозакріпленими абразивними частками (дисперсність шкурки 40–60 мкм) на дослідній машині HECKERT.

Аналіз результатів тертя композитів (див. табл.1) жорсткозакріпленими абразивними частками показав, що введення плакованого сплаву ПКХН-15 призводить до зменшення показника абразивного стирання ароматичного поліаміду фенілон у 6,2–9 разів, що обумовлено збільшенням твердості композитів по мірі збільшення кількості наповнювача. Також слід відзначити значне збільшення мікротвердості на межі поділу «полімер-наповнювач», що може свідчити про наявність взаємодії між полімером та наповнювачем. Для встановлення виду взаємодії доцільно провести додаткові дослідження.

Таблиця. Технічні характеристики композиційних матеріалів

Показник	Вміст сплаву ПКХН-15				
	0	10	20	30	40
Показник абразивного стирання, V, мм <sup>3</sup> /м	1,8	0,29	0,27	0,25	0,20
Мікротвердість на межі поділу «полімер-наповнювач», HV, од. тв.	-	172,0	193,5	225,6	171,7





## ДОСЛІДЖЕННЯ МОРФОЛОГІЇ ПОВЕРХНІ ТОНКИХ ПЛІВОК $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$

Іванна Медвідь, Володимир Бігдай, Марія Процак, Катерина Біляк,  
Богдан Бордун, Ірина Кофлюк, Віктор Сорокін

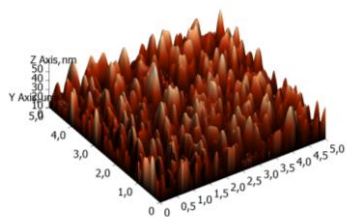
Львівський національний університет імені Івана Франка,  
факультет електроніки та комп'ютерних технологій,

м. Львів, вул. Драгоманова, 50, email: [ivanna.medvid@lnu.edu.ua](mailto:ivanna.medvid@lnu.edu.ua)

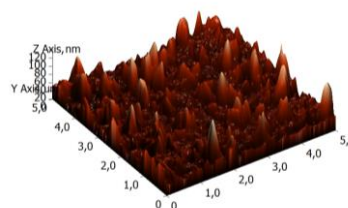
Галат цинку ( $\text{ZnGa}_2\text{O}_4$ ) викликає інтерес у дослідників, оскільки він є перспективним матеріалом для різноманітних застосувань, зокрема, як прозорий провідний оксид, фотокаталізатор, газовий сенсор. Властивості тонких плівок галату цинку вивчалися для можливого використання у сонячних елементах, оскільки вони є широкозонними напівпровідниками та мають добру прозорість у видимому діапазоні. Електричні, оптичні властивості та морфологія поверхні тонких плівок  $\text{ZnGa}_2\text{O}_4$  залежать від методів та умов отримання, введення домішок, а також, від інших способів обробки плівок, наприклад, таких як відпал. Тонкі плівки  $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$  отримувалися методом ВЧ іонно-плазмового розпилення на підкладках з плавленого кварцу  $\nu\text{-SiO}_2$ . Після осадження тонких плівок здійснювалася їх термообробка в атмосфері кисню або аргону при температурі 1000–1100 °С, а також в атмосфері водню при температурі 600 – 650 °С. Рентгенодифракційні дослідження тонких плівок показали наявність полікристалічної структури. Морфологія поверхні тонких плівок  $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$  досліджувалася з використанням АСМ мікроскопа. Зображення поверхні плівок реєструвалися у напівконтактному режимі. Дослідження морфології поверхні плівок  $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$  проводилося для невідпаленої та відпаленої плівки у атмосфері аргону. Дані аналізувалися з поверхні розміром  $5 \times 5$  мкм.

Таблиця 1

Плівка	Атмосфера відпалу	Середня квадратична шорсткість поверхні, нм	Середній діаметр зерен, нм
$\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$	без термообробки	9,6	211
$\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$	аргон	14,6	222



*a*



*б*

Рис. 1. Морфологія поверхні плівок  $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$ : *a* – без термообробки, *б* – відпалених в атмосфері аргону

Отримані результати показують, що наявність відпалу приводить до зміни морфології поверхні тонких плівок  $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$  і збільшення розмірів нанокристалічних зерен, які формують дані плівки.



## ANALYSIS OF THE SHORT-RANGE ORDER IN THE Al-Co-Sn MELTS

**Muratov A.S., Kashyrina Ya.O., Roik O.S.**

Taras Shevchenko National University of Kyiv,  
01601, Kiev, 64/13 Volodymyrska str.; muratov\_os@univ.kiev.ua

In our previous work [1], the structure of Al-Co-Sn melts has been simulated by means of the *ab initio* method of molecular dynamics (MD) using the Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) software. This work is devoted to the analysis of the short-range order (SRO) in ternary melts of the composition  $Al_{25}Co_xSn_{75-x}$  (where  $x = 10, 20, 55, 61.5$  at.%),  $Al_{26}Co_{39}Sn_{35}$ ,  $Al_xCo_{20}Sn_{80-x}$  (where  $x = 52, 60$  at.%),  $Al_{62.5}Co_{25}Sn_{12.5}$  and  $Al_{80}Co_{10}Sn_{10}$  at a temperature  $50^\circ C$  above the liquidus line using data from *ab-initio* MD simulations.

The concentration dependence of partial pair distribution functions ( $g_{ij}(r)$ ) and partial nearest neighbour distances ( $R_1(i-j)$ ) have been discussed. Additionally, the obtained MD models of the Al-Co-Sn melts have been analyzed using Voronoi diagram and Delaunay tessellation. The metric characteristic of the Voronoi polyhedrons (VP's), which is the geometrical image of the local environment of central atoms, was used to examine the SRO in detail. A close packing of atoms in the MD models of investigated melts has been also analyzed using Delaunay tessellation.

However, it should be noted some drawbacks. The obtained MD models of the ternary alloys contain a rather small number of atoms in the model cell (500 atoms) and there is only one equilibrium structure for each liquid alloy after modeling, which is explained by the large computational costs of each calculation. To overcome these drawbacks more equal structures based on different random initial cells should be obtained as well as model cells with a large number of atoms and an effective potential using a machine learning method based on data from smaller systems should be used to analyze the SRO.

- [1] O. Muratov, Ya. Kashyrina, O. Roik, in: Abstr. of International Conference of Students and Young Scientists in Theoretical and Experimental Physics HEUREKA-2022, Lviv, (2022), p. H4.





## NEW PHOTOVOLTAIC MATERIAL - $\text{LiH}_3(\text{SeO}_3)_2$ FERROELECTRIC

**O. Vira, Yu. Eliyashevskyy, K. Senin, V. Kapustianyk**

Physical Department, Ivan Franko National University of Lviv,  
Dragomanova st., 50, UA79005 Lviv, Ukraine

Nowadays the solar energy is an important component of renewable energy, with a dominant of solar cells based on the  $p$ - $n$  junction. However, the production of such solar panels on the basis of semiconductors faces with a limitation of efficiency arising from the peculiarities of the band structure of semiconductors and its single bandgap fundamental limit [1]. Therefore, the main goal for the renewable energy is the search for new materials for the solar cells development, which can provide a significant increase in the efficiency of solar panels. The ferroelectric crystals, which possess a domain structure, can be considered as materials for converting of solar energy into electrical energy. The photogenerated charge carriers can be spatially separated due to the presence of domain walls in ferroelectrics and influence of the internal electric field caused by spontaneous polarization. Due to existence of the spontaneous polarization in the ferroelectric non-centrosymmetric crystals the free charges arising under light irradiation can be separated and collected. It is important to note, that the ferroelectric materials can achieve much higher open circuit voltages in comparison with the heterojunctions based on semiconductors, where the band gap limiting is observed [2]. Since the ferroelectric phase exists in a certain temperature range, study of the crystals with ferroelectric properties at room temperature looks very promising for practical applications. First of all, this concerns  $\text{LiH}_3(\text{SeO}_3)_2$  ferroelectric crystal which may be considered as very attractive photovoltaic material for use in the solar energetics. Its ferroelectric phase exists in a very wide temperature range: 177-373 K [3]. The structural study of  $\text{LiH}_3(\text{SeO}_3)_2$  crystal demonstrated that the polar direction [001] is perpendicular to the crystallographic plane within of which the sufficiently strong O-H...O bonds are located [4].

For the photovoltaic measurements  $\text{LiH}_3(\text{SeO}_3)_2$  sample was illuminated by light of the LEDs manufactured by Thorlabs Inc. with the wavelengths of 285 nm and 365 nm. The ferroelectric hysteresis loops, current and voltage measurements as well as their time dependence behavior under the influence of UV radiation were measured using a Keithley 6517A electrometer.

The study of the photovoltaic response of  $\text{LiH}_3(\text{SeO}_3)_2$  crystal under the influence of UV radiation were performed at room temperature. The time dependences of the photovoltage as well as photocurrent show a large photoresponse under the influence UV illumination. The open circuit photovoltage is equal 0.3 V/mm. The dielectric hysteresis loops, obtained under irradiation and in darkness, demonstrated a sufficient UV light exposure. This behavior of  $\text{LiH}_3(\text{SeO}_3)_2$  crystal's electric properties is explained by a change in the dynamics of the photocarriers generated by UV light in the internal electric field of the crystal and confirms existence of a noticeable photovoltaic effect in in this material.

This work was supported by the National Research Foundation of Ukraine in the framework of the project 2020.02/0130 "Multifunctional organicoorganic magnetoelectric, photovoltaic and scintillation materials".

- [1] W. Shockley and H. J. Queisser J. Appl. Phys. 32 (1961) p. 510–9.
- [2] Xudong Qi, Kai Li, Enwei Sun, Bingqian Song, Da Huo, Jiaming Li, Xianjie Wang, Rui Zhang, Bin Yang, Wenwu Cao, Journal of Materials Science & Technology (2021).
- [3] R. Pepinsky and K., *Phys. Rev.* 114, 1217.
- [4] K. Vedam, Y. Okaya and R. Pepinsky. *Phys. Rev.* 119, 1252.



## STATE DIAGRAMS OF CYCLIC HYDROCARBONS

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

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

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

There are separate data on phase  $P$ - $T$  diagrams of cyclic hydrocarbons, while  $V$ - $T$  diagrams are practically not studied. We tried to make up for this shortcoming using both literary and our own experimental data, obtained during the study of isochoric thermal conductivity at different molar volumes and thermal pressure of a number of cyclic compounds [1-3]. The technique of the conducted studies made it possible to work in a limited temperature range near melting [4]; therefore, in this paper, we mainly discuss the high-temperature stable phases of these compounds. The accuracy of determination of molar volumes was no worse than  $\pm 0.2\%$  and  $\pm 2\%$  for pressure.

Phase  $P$ - $T$  and  $V$ - $T$  diagrams of solid homocyclic hydrocarbons: benzene ( $C_6H_6$ ), cyclopentane ( $C_5H_{10}$ ) were constructed using both literature and our own experimental data obtained during the study of isochoric thermal conductivity in high temperature phases. The  $V$ - $T$  phase diagrams of cyclohexane ( $C_6H_{12}$ ) presented earlier, was refined and supplemented with  $P$ - $T$  diagrams. The possibility of constructing a phase diagram for cyclohexene ( $C_6H_{10}$ ) is also discussed. The changes in molar volume during melting and the boundaries of the existence of high temperature phases have been determined. The magnitudes of thermal pressure in high-temperature phases are obtained.

### Acknowledgments

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

[1] V.A. Konstantinov, V.P. Revyakin, V.V. Sagan, O.I. Pursky, and V.M. Sysoev, J. Exp. Theor. Phys. 139, 220 (2011).

[2] V.A. Konstantinov, A.I. Krivchikov, O.A. Korolyuk, V.P. Revyakin, V.V. Sagan, G.A. Vdovichenko, and A.V. Zvonaryova, Physica B, 424, 54 (2013).

[3] V.A. Konstantinov, V.P. Revyakin, V.V. Sagan, V.P. Revyakin, O.I. Pursky, Cent. Eur. J. Phys. 12(9), 654 (2014).

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



## EVOLUTION OF OPTICAL PROPERTIES OF SILICON DOPED HAFNIA THIN FILMS STIMULATED BY THERMAL TREATMENT IN NITROGEN ATMOSPHERE

**D. Khomenkov<sup>1</sup>, S. Ponomaryov<sup>2</sup>, O. Melnichuk<sup>1</sup>,  
L. Melnichuk<sup>1</sup>, L. Khomenkova<sup>3</sup>, F. Gourbilleau<sup>4</sup>**

<sup>1</sup> Nizhyn Mykola Gogol State University, 2 Graftska str., Nizhyn, Ukraine

<sup>2</sup> V. Lashkaryov ISP of NASU, 41 Pr. Nauky, Kyiv, Ukraine

<sup>3</sup> National university "Kyiv-Mohyla academy", 2 Skovorody str., Kyiv, Ukraine

<sup>4</sup> CIMAP/ENSICAEN, 6 Boulevard Marechal Juin, Caen, France

Hafnium oxide ( $\text{HfO}_2$ ) thin films offer a high thermal stability, a wide band-gap and a high dielectric constant that make them very attractive for microelectronic application. Being produced by different vapor deposition approaches, these films show the tendency to be crystallized at the temperature 300-350 °C that causes a high leakage current. Different research groups demonstrated a strong dependence of the structural properties of  $\text{HfO}_2$  films on the fabrication approach and deposition regimes as well as on the post annealing treatment. Among different deposition approaches, RF magnetron sputtering is known to be non-equilibrium approach that allowed amorphous  $\text{HfO}_2$  films to be prepared. Besides, additional doping with low amount of silicon conserves their amorphous nature.

Hafnia films show also higher refractive index than  $\text{SiO}_2$  films that makes them perspective for waveguide application. However, optical characterization of such films was much less addressed. In present study,  $\text{HfO}_2$  and Si-doped  $\text{HfO}_2$  films were deposited on Si substrates by RF magnetron sputtering and the evolution of their optical properties and morphology was investigated by means of photoluminescence, ellipsometry and FTIR spectroscopy as well as by Scanning Auger microscopy.

It was observed that Si doping of  $\text{HfO}_2$  films increases their refractive index up to 2.42 (at 632 nm) against 1.98-2.00 obtained for pure  $\text{HfO}_2$  films. Along with this, being of about 700 nm thickness, such films demonstrate amorphous structure and homogeneous chemical composition. An annealing treatment at 400-800 °C in nitrogen atmosphere did not results in the phase separation that make such films attractive for optical applications, for instance, for different types of the waveguides.

An annealing at 900-1100 °C favors the formation of  $\text{SiO}_2$  and  $\text{HfO}_2$  phases. The crystalline structure of the latter was found to be monoclinic one for Si content lower than 6 at.% and tetragonal one for Si content of 9-12 at.%. This phenomenon was assumed to be caused by the presence of some residual Si atoms in  $\text{HfO}_2$  phase due to incomplete phase separation process. However, some alternative explanation will be also considered.



## STRUCTURAL AND ELECTRICAL PROPERTIES OF SUPERIONIC SINGLE CRYSTAL AND CERAMIC BASED $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$ SOLID SOLUTIONS

**I.O. Shender, L.M. Suslikov, A.I. Pogodin, M.J. Filep, T.O.  
Malakhovska, O.P. Kokhan**

Uzhhorod National University, Pidgirna St. 46, Uzhhorod 88000, Ukraine

Superionic conductors with the argyrodite structure play an important role in modern materials science and are promising materials suitable for creating electrochemical sensors and solid-state energy sources based on them. Argyrodites are able to form solid solutions due to the peculiarities of their crystal structure, which allows to controllably change their physical and chemical parameters [1-3]. That is why the study of the influence of cationic substitution on the structural and electrical properties of superionic conductors of the  $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$  solid solutions is relevant.

The single crystals growth of  $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$  solid solutions ( $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ ) was carried out by the method of direct crystallization using the melt-solution technique. According to the results of refinement by the Rietveld method, it was established that a continuous series of  $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$  solid solutions is formed. Thus, the studied solid solutions of the  $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$  ( $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ ) composition crystallize in the structure of argyrodite with space group F-43m.

Ceramic samples based on synthesized  $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$  phases were made using micro- and nanocrystalline powders. The microcrystalline powders were obtained by grinding in an agate mortar, and the nanocrystalline powders were prepared in a PQ-N04 planetary ball mill by grinding for 30 and 60 min. XRD studies of micro- and nanopowders (DRON 4-07 with  $\text{CuK}\alpha$  radiation,  $\Delta 2\theta = 0.02^\circ$ , exposure – 1 s) showed that the structure of argyrodite is preserved and the lines are broadened when the particle size decreases.

The temperature (292–383 K) and frequency (10 Hz– $2 \times 10$  GHz) dependences of the total electrical conductivity of single crystalline and ceramic samples of  $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$  ( $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ ) solid solutions was investigated. Obtained results were analysed by Nyquist plots using the electrode equivalent circuits approach. A comparative analysis of the electrical parameters of single crystalline and ceramic samples of studied solid electrolytes showed that ceramics are more suitable than crystals for the development of solid-state batteries, not only due to their high ionic conductivity, but also because of their greater manufacturability and cost-effectiveness.

[1] C. Zhao, L. Liu, X. Qi, Y. Lu, F. Wu, J. Zhao, Y. Yu, Y.-S. Hu, L. Chen, Solid-state sodium batteries, *Adv. Energy Mater.* 8 (2018) 1703012, <https://doi.org/10.1002/aenm.201703012>.

[2] T. Nilges, A. Pfitzner, A structural differentiation of quaternary copper argyrodites: structure – property relations of high temperature ion conductors, *Z. Kristallogr.* 220 (2005) 281–294, <https://doi.org/10.1524/zkri.220.2.281.59142>.

[3] H.-J. Deiseroth, S.-T. Kong, H. Eckert, J. Vannahme, C. Reiner, T. Zaiß, M. Schlosser,  $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{X}$ : a class of crystalline Li-rich solids with an unusually high  $\text{Li}^\beta$  mobility, *Angew. Chem. Int. Ed.* 47 (2008) 755–758, <https://doi.org/10.1002/anie.200703900>.



## ПОВЕРХНЕВИЙ НАТЯГ РОЗПЛАВУ Cu-Pb З ДОМІШКАМИ Ga

**Роман Овсяник, Степан Мудрий, Роман Білик**  
Львівський національний університет імені Івана Франка,  
вул. Кирила і Мефодія 8, 79005, м. Львів,  
roman\_ovsyanyk@ukr.net

Вивчення поверхневого натягу рідин та металевих розплавів залишається актуальним завданням не лише для фундаментальної науки, а й матеріалознавства, через широкий спектр їхнього застосування в різноманітних галузях промисловості. Відомо, що цю важливу властивість рідкого стану речовини використовують у металургії, електроніці, фармацевтиці, продуктивій промисловості, нанотехнологіях і т. д. Зважаючи на те, що в минулому столітті було розроблено теоретичні моделі розрахунку поверхневого натягу ідеальних і регулярних бінарних розчинів, які показують добре узгодження з експериментом, що був проведений в широких концентраційних та температурних інтервалах, зараз на передній план виступає експериментальне вивчення й теоретична розробка опису поверхневого натягу в бінарних рідких системах з домішками, й особливо в рідких високоентропійних сплавах. Дана робота присвячена саме цьому.

Дослідження поверхневого натягу системи CuPb з домішками Ga було проведено методом лежачої краплі. Одержані зображення профілю краплі з використанням цифрового фотоапарата під час нагріву зразка в інертній атмосфері в широкому температурному діапазоні оброблялися за допомогою комп'ютерної програми. Далі відбувався розрахунок об'єму та коефіцієнта поверхневого натягу зразка й формування файлу-звіту.

В результаті проведених експериментів встановлено, що коефіцієнт поверхневого натягу досліджуваного рідкого розплаву виявляє концентраційну залежність від наявності домішок галію. Виявлено, що збільшення концентрації Ga веде до зменшення поверхневого натягу в системі. Така поведінка пояснюється змінами структури ближнього порядку, які приводять до утворення хімічно впорядкованих кластерів Cu-Ga і перерозподілу концентрації свинцю в об'ємі розплаву, в результаті чого його поверхня збагачена саме свинцем. Така сама поведінка поверхневого натягу спостерігається і при додаванні наночастинок галію до розплаву. Отже, можна стверджувати, що Ga є так званим поверхнево-активним елементом в досліджуваній системі, оскільки зменшує величину її поверхневого натягу, але, не опиняючись при цьому на її поверхні.





## МАГНІТНИЙ РЕЗОНАНС В ГІБРИДНИХ КОМПОЗИТАХ НА ОСНОВІ ПОЛІФЕНІЛЕНСУЛЬФІДУ

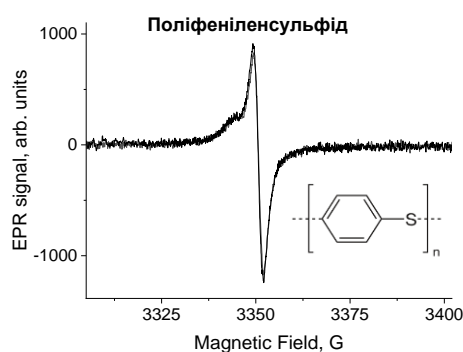
<sup>1</sup>Анна-Марія Томіна, <sup>2</sup>Сергій Красновид, <sup>2</sup>Андрій Кончиць

<sup>1</sup>Дніпровський державний технічний університет, вул.  
Дніпробудівська, 2, Кам'янське 51918, Україна

<sup>2</sup>Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАНУ,  
пр-т Науки, 41, Київ 03028, Україна

[an.mtomina@gmail.com](mailto:an.mtomina@gmail.com)

Перспективним напрямком сучасного матеріалознавства є розробка полімерних композиційних матеріалів (ПКМ) на основі термопластичних в'язучих. Завдяки високим показникам міцності, жорсткості та зносостійкості, в поєднанні з відносно низькою вартістю, ці ПКМ створюють альтернативу металевим матеріалам, зокрема, триботехнічного призначення, в машинобудуванні та інших галузях [1]. Трендом останніх років є розробка гібридних композитів, що дозволяє покращити характеристики ПКМ за рахунок так званого «синергетичного ефекту». В даній роботі розроблено та досліджено методом електронного парамагнітного резонансу (ЕПР) гібридні ПКМ на основі поліфеніленсульфіду, що містить як наповнювач суміш вуглецевого волокна (ВВ) марки Тогау 700S та сріблястого графіту (СГ) в різних співвідношеннях. Метод ЕПР дозволяє визначати електронну структуру ПКМ та механізми взаємодії між всіма його складовими.



Встановлено, що спектр ЕПР ПФС (див. рис.) характеризується наявністю двох типів дефектів, один з яких пов'язаний з обірваними зв'язками в полімерних ланцюжках, а інший – з наявністю атомів сірки. Спектри ЕПР ВВ та СГ в гібридному ПКМ мають типовий для цих структур вигляд і значну інтенсивність. При цьому лінія ЕПР ВВ Тогау як окремо, так і в композиті, має асиметричну форму, вказуючи на значну провідність цих ВВ, а її

ширина, рекордно вузька порівняно з іншими марками ВВ, вказує на відмінну структурну досконалість ВВ, оскільки ширина і форма ліній ЕПР в провідних зразках визначаються параметром  $R = T_D/T_2$ ;  $T_D$  - час дифузійного пробігу електрона через скін-шар,  $(T_2)^{-1}$  – швидкість спінової релаксації електрона. Виявлено також, що параметри спектрів ВВ і СГ у ПКМ дещо відрізняються від таких у наповнювачах окремо, що опосередковано може свідчити про прояв ефекту синергії.

[1] A. Konchits, Ye. Yeriomina, A.-M. Tomina, O. Lysenko, S. Krasnovyd, O. Morozov. Advanced Polymer Composites for Use on the Earth and in Space. In: Nanotechnology in Space. Ed. Pan Stanford Publishing (2021), P. 71-119.



## ТЕРМІЧНА СТАБІЛЬНІСТЬ ТА МАГНІТООПІР НАНОКОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ЕВТЕКТИКИ Ga-In-Sn

**М. Клепач, І. Штаблавий**

Фізичний факультет Львівського національного університету імені Івана  
Франка, вул. Кирила і Мефодія, 8, 79005 Львів.  
e-mail mykhailo.klepach@lnu.edu.ua

Технологічні досягнення останніх десятиліть і зокрема розвиток нанотехнологій відкрили важливі фундаментальні та прикладні напрямки досліджень, спрямовані на нові методи виробництва функціональних матеріалів з комплексом необхідних властивостей, які можна контролюваними способами створювати, на протязі певного часу підтримувати або змінювати. Магнітні матеріали із заданими властивостями, як окремий клас таких матеріалів користуються великим попитом у якості конструкційних матеріалів для елементів приладів та машин, а також для виробництва пристроїв функціональної електроніки.

Коло фундаментальних та практичних завдань в останні роки суттєво розширилось завдяки відкриттю нових фізичних ефектів у магнітних системах (гігантський магнітоопір, квантовий ефект Холла, суперпарамагнетизм) і впровадженню нанотехнологій. Проте, появились нові вимоги по створенню магнітних систем з особливими функціональними властивостями, таких як магнітні рідини, квантові магнітні рідини, багатошарові тонкоплівкові композити тощо.

Зважаючи на значну реакційну здатність розплавів існує ймовірність розчинення наночастинок у рідкій матриці, що спричинить небажані зміни властивостей нанокompозитів. У зв'язку з цим в цій роботі досліджено стабільність композитів з рідкою матрицею Ga-In-Sn і наночастинками на основі Ni-Fe як наповнювача. Композити синтезовано методом механічного змішування наночастинок з розплавом. Як нанонаповнювач використовували наночастинки  $\text{NiFe}_2\text{O}_4$  та наночастинки, відновлені воднем.

Термічну стабільність нанокompозитів досліджено методом диференціального термічного аналізу у вакуумі та в атмосфері водню. Фазовий склад сплавів досліджено методом рентгенівської дифракції. Крім того, досліджено вплив фазового складу композитів до та після термообробки на їх магнітоопір.



## МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ ДОМІШКИ МАРГАНЦЮ НА ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІВ $K_2SO_4$

М.Я. Рудиш, П.А. Щепанський, Р.С. Брезвін, В.Й. Стадник

Львівський національний університет імені Івана Франка, фізичний факультет, вул. Кирила і Мефодія 8, 79005, Львів, Україна,  
e-mail: rudysh.myron@gmail.com

У роботі досліджено вплив впровадження домішки іонів марганцю на властивості кристалі  $K_2SO_4$ . Дослідження проведено використовуючи теоретичну модель в рамках теорії функціоналу густини. Усі розрахунки проводились самоузгоджено, розв'язуючи рівняння Кона-Шема. Як вхідні дані для проведення розрахунків використано експериментальні результати дослідження кристалічної структури досліджуваної сполуки отриманих для синтезованих нами зразків.

Значну увагу приділено вивченню зміни хімічних зв'язків в структурі кристала. Для цього побудовано просторові розподіли електронної густини навколо атомів та розглянуто їхні перерізи. Проаналізовано заселеність хімічних зв'язків та заселеності атомів.

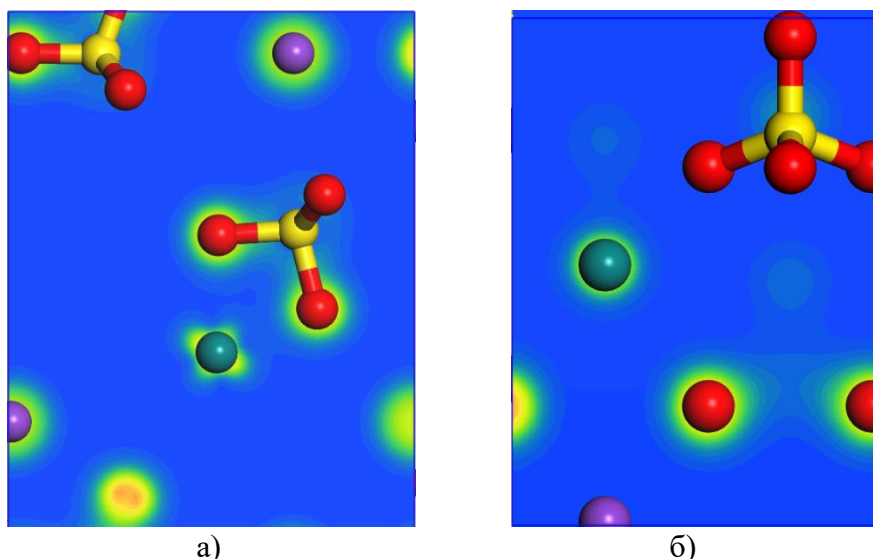


Рис. 1. Переріз розподілу електронної густини кристала  $K_2SO_4$ : Mn від синього ( $0.0 \text{ e}/\text{Å}^3$ ) до червоного ( $2.5 \text{ e}/\text{Å}^3$ ) кольорів, відповідно. а)  $ac$  – площина; б)  $ab$  – площина.

Розраховано та проаналізовано оптичні спектри кристала. З'ясовано трансформацію спектра діелектричної функції при впровадженні домішки марганцю порівняно з чистим кристалом.

Робота виконана в рамках проекту 2020.02/0211 «Експериментально-теоретичне вивчення і прогнозування фотопружних властивостей кристалічних матеріалів для пристроїв керування електромагнітним випромінюванням» за грантової підтримки Національного фонду досліджень України.





## ДОСЛІДЖЕННЯ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРУ ДЕФЕКТІВ, КОТРІ ВПЛИВАЮТЬ НА ПОЛЯРИЗАЦІЙНІ ПРОЦЕСИ У КРИСТАЛАХ *p-Si*

Андрій Жигіль, Роман Лис

Львівський національний університет імені Івана Франка,  
кафедра сенсорної та напівпровідникової електроніки,  
вул. Гарнавського, 107. Львів 79017, Україна.  
E-mail: andriybanderivets@gmail.com

На даний момент кремній залишається важливим матеріалом для виготовлення електронних пристроїв різного призначення. Дослідження енергетичних спектрів пасток дозволяє керувати, та покращувати характеристики і параметри приладів, структура яких базується на використанні структур Si-SiO<sub>2</sub>.

Під час досліджень використовувалися монокристали кремнію *p* типу провідності (КДБ-10). Алюмінієві омичні контакти були напилені на поверхню (111) даних кристалів. Вимірювання струму деполяризації проводилось в режимі лінійної зміни температури зі швидкістю 13,5 °C/хв після охолодження даної структури. Величина поляризаційного поля становила  $2 \cdot 10^3$  В/см.

Досліджено спектри ТСД кристалів *p-Si* в інтервалі температур 150 – 460 К. Деполяризаційний струм досліджуваної структури Si-SiO<sub>2</sub> в даних інтервалах температур формується за допомогою двох типів носіїв: Низькоенергетичними – звільненими через теплове збудження, та високоенергетичними носіями, що звільнені з високоенергетичних пасток.

Носії заряду здатні мігрувати в аморфній сітці SiO<sub>2</sub> та заповнювати низько- та високоенергетичні пастки. Трансформація структури водневовмісних та дефектно-домішкових комплексів, а також заряд додатних локалізованих іонів у міжфазній межі Si-SiO<sub>2</sub> підтверджує електричну перебудову даної структури.



# ЛЮМІНЕСЦЕНЦІЯ ТА ЦЕНТРИ ЗАХОПЛЕННЯ НОСІЇВ ЗАРЯДУ В КРИСТАЛАХ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ $\beta\text{-Ga}_{1,9}\text{In}_{0,1}\text{O}_3:0,05\%\text{Cr}^{3+}$

**Маркіян Гащук, Андрій Лучечко, В'ячеслав Васильців**  
Львівський національний університет імені Івана Франка,  
Кафедра сенсорної та напівпровідникової електроніки  
вул. Ген. Тарнавського, 107, Львів, 79017, Україна  
[gashukm51@gmail.com](mailto:gashukm51@gmail.com)

Сьогодні оксид галію привертає увагу дослідників як широкозонний напівпровідник для використання у силовій електроніці. За останні роки опубліковано багато наукових робіт присвячених дослідженню його люмінесценції та енергетичних рівнів, утворених домішками і власними дефектами. Такі дефекти можуть захоплювати носії заряду з наступним вивільненням під дією температури чи світла. Саме наявність центрів захоплення надає нові можливості для зміни електричних, оптичних, фотоелектричних та люмінесцентних властивостей оксиду галію та твердих розчинів на його основі [1-3].

Для досліджень використовувалися зразки монокристалів твердого розчину  $\beta\text{-Ga}_{1,9}\text{In}_{0,1}\text{O}_3:0,05\%\text{Cr}^{3+}$ . Спектри свічення кристалів отримували з використанням спектрофлуориметра CM-2203. При вимірюванні кривих термостимульованої люмінесценції (ТСЛ) зразки перед нагрівом поміщали у криостат та опромінювали УФ світлом. Температура контролювалась за допомогою мідь-константанової термопари, з'єднаної з терморегулятором PE-205. Сигнали з цифрового контролера передавали інформацію про інтенсивність та температуру на ПК.

За температури рідкого азоту у люмінесценції кристалів твердого розчину  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3\text{-In}_2\text{O}_3$  домінують R-лінії, які є типовими для іонів  $\text{Cr}^{3+}$  і виникають за рахунок випромінювальних переходів від збудженого рівня  ${}^2\text{E}$  до основного стану  ${}^4\text{A}_2$ . За кімнатної температури в спектрі люмінесценції кристалів твердого розчину, на відміну від кристалів оксиду галію, проявляється тільки широка смуга, яка відповідає переходам  ${}^4\text{T}_2 \rightarrow {}^4\text{A}_2$  в іонах  $\text{Cr}^{3+}$ .

Опромінюючи кристали твердого розчину при температурі рідкого азоту світлом в ділянці фундаментального поглинання з довжиною хвилі  $\sim 250$  нм, при наступному нагріванні, спостерігається ТСЛ при температурах 150-275 К. Для кристалів  $\text{Ga}_{1,9}\text{In}_{0,1}\text{O}_3:0,05\%\text{Cr}^{3+}$  спектр пасток є більш складним, порівняно з кристалами  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ , і може бути дослідженим за допомогою методів температурної очистки максимумів ТСЛ та фракційного термовисвічування.

[1] J.B. Varley, J. Mater. Res., **36**, 4790 (2021).

[2] A. Luchechko, V. Vasylytsiv, et al., ECS J. Solid State Sci. Technol., **9**, 5008 (2020).

[3] J. Pearton, J. Yang, et al., Applied Physics Reviews, **5**, 011301 (2018).





**СЕКЦІЯ В**

***ОПТИКА І СПЕКТРОСКОПІЯ***

**SECTION B**

***OPTICS AND SPECTROSCOPY***



## ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА УСТАНОВКА ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ЛЮМІНЕСЦЕНЦІ ХАЛЬКОГЕНІВ В ГАЗОВОМУ РОЗРЯДІ

Андрій Генерал

Інститут електронної фізики НАН України, вул. Університетська, 21,  
м. Ужгород,  
e-mail: general.andriy@gmail.com

Все більшу увагу науковців звертають на себе порівняно мало досліджувані газорозрядні джерела низькотемпературної плазми на парах деяких халькогенів, зокрема сірки, селену та телуру, оскільки вони є досить поширені в природі та мають значний спектр практичних застосувань. В кінці минулого століття в США фірмою Fusion System Corp. було вперше створено та застосовано безелектродні НВЧ лампи з НВЧ-накачуванням на частотах 915 і 2450 МГц, на основі парів сірки. А вже в 2006 році LG Electronics почала серійне виробництво освітлювачів на основі сірчаних ламп, спектр випромінювання яких подібний до сонячного.

В одному ряді із сіркою не менш перспективними для практичних застосувань можуть бути робочі середовища на основі інших халькогенів, наприклад, парів селену або телуру. В якості буферних газів для створення робочих сумішей на основі парів халькогенів (випромінює молекула халькогену, електронний перехід  $B \rightarrow X$  даних молекул), здебільшого використовуються неон чи аргон.

Детальніше основні вузли, саму експериментальну установку «Плазма» та методику вимірювань можна описати таким чином. Газовий розряд збуджувався із використанням тиратронного генератора з комутатором ТГІ1-2000/35 та резонансного перезаряду накопичувальної ємності 1650 пФ. Високовольтний імпульсний блок живлення ГРТ, що використовувався в дослідженнях, забезпечував імпульсну напругу до 10 кВ, частоту повторення імпульсів від одиниць Гц до 10 кГц, середній розрядний струм до 500 мА, а максимальну вихідну потужність до 2,5 кВт. Часові характеристики імпульсів випромінювання плазми реєструвалися апаратним комплексом на базі спектрального монохроматора МДР-6 з фотоелектронним помножувачем ФЕП-106, сигнал з якого виводився на один з каналів осцилографа С1-99. Датчиками імпульсів струму і напруги на газорозрядному пристрої слугували коаксіальний шунт із опором 0,055 Ом та ємнісний подільник напруги. Інтегровані у часі емісійні характеристики газових розрядів реєструвалися за допомогою спектрометра, побудованого на базі спектрального монохроматора MS 7504i. До складу спектрометричного комплексу входили також два детектори оптичного випромінювання: ПЗЗ-лінійка - HS 101H та фотоелектронний помножувач - R928. Монохроматор MS 7504i виготовлений та спроектований фірмою SOLAR TII за горизонтальною оптичною схемою Черні-Тьорнера з компенсацією астигматизму. Дана оптична схема дозволяє уникнути повторного відбивання випромінювання від дифракційних ґраток. Було досліджено спектральний склад одержаного випромінювання газорозрядної плазми в області довжин хвиль 200–1000 нм. Детальніше роботу експериментальної установки описано в праці [1].

[1] A. Heneral, S. Avtaeva, Plasma Chemistry and Plasma Processing, **40**, 839 (2020).



## ДОСЛІДЖЕННЯ ЛЮМІНЕСЦЕНЦІЇ БІОМОЛЕКУЛ В ГАЗОВОМУ РОЗРЯДІ НИЗЬКОГО ТИСКУ

**Андрій Генерал, Євген Світличний**

Інститут електронної фізики НАН України, вул. Університетська, 21, м.  
Ужгород,  
e-mail: general.andriy@gmail.com

Амінокислоти – органічні сполуки, які одночасно містять у своєму складі аміно- ( $-\text{NH}_2$ ) та карбоксильну ( $-\text{COOH}$ ) групи. У всіх досліджуваних нами біомолекул, а саме амінокислот  $\alpha$ -атом карбону утворює ковалентні зв'язки із чотирма різними групами: карбоксильною, аміногрупою, бічним ланцюгом і атомом гідрогену.

Дана робота присвячена експериментальному дослідженню люмінесцентних характеристик суміші парів біомолекул з інертними газами методом оптичної спектроскопії, тобто на основі результатів досліджень фотофізичних процесів, в низькотемпературній газорозрядній плазмі у спектральній області 200–1000 нм. Для експериментальних досліджень нами були використані порошки біомолекул (метіоніну, глютаміну, треоніну та ін.) виробництва фірми SigmaAldrich чистотою ~ 99,9 %. Збудження люмінесценції низькотемпературної плазми на основі парів біомолекул здійснено газовим розрядом низького тиску із добавкою інертних газів, а саме аргону або гелію. Подібного роду дослідження проводяться вперше.

Детальніше основні вузли, саму експериментальну установку «Плазма» та методику вимірювань було описано в праці [1].

Отримані нами спектри люмінесценції сумішей на основі біомолекул в імпульсно-періодичному розряді в основному треба віднести до нейтральних сполук. Спектральних ліній та переходів, що відповідають позитивним іонам фрагментів, зареєстровано не було. За наших умов експерименту їх утворення є малоімовірним. У всіх випадках нашими експериментами було встановлено, що одними із основних є процеси фрагментації біомолекул в газовому розряді низького тиску із відділенням карбоксильної групи  $-\text{COOH}$  або залишку R бічного ланцюга амінокислоти, а також в розряді спостерігалось утворення із аміногрупи  $-\text{NH}_2$  молекулярного азоту із випромінюванням другої позитивної системи цієї молекули ( $C \rightarrow B$  перехід) в ультрафіолетовій області спектру. В результаті з'являються збуджені молекули азоту ( $\text{N}_2$ ) і монооксиду вуглецю ( $\text{CO}$ ). До утворення збуджених молекул  $\text{CO}$  в газовому розряді призводить дисоціація карбоксильної групи  $-\text{COOH}$  під впливом метастабільних атомів аргону з енергією збудження близько 11 еВ (потенціал іонізації молекул  $-\text{COOH}$  близько 8 еВ). У подібних процесах відбувається утворення та збудження молекул азоту, які найімовірніше виникають при розвалі аміногруп досліджуваних нами біомолекул.

Максимуми отриманої нами люмінесценції випромінювання низькотемпературної плазми знаходяться при тисках інертного газу, які не перевищують 40 Тор.

[1] A. Heneral, S. Avtaeva, Plasma Chemistry and Plasma Processing, **40**, 839 (2020).



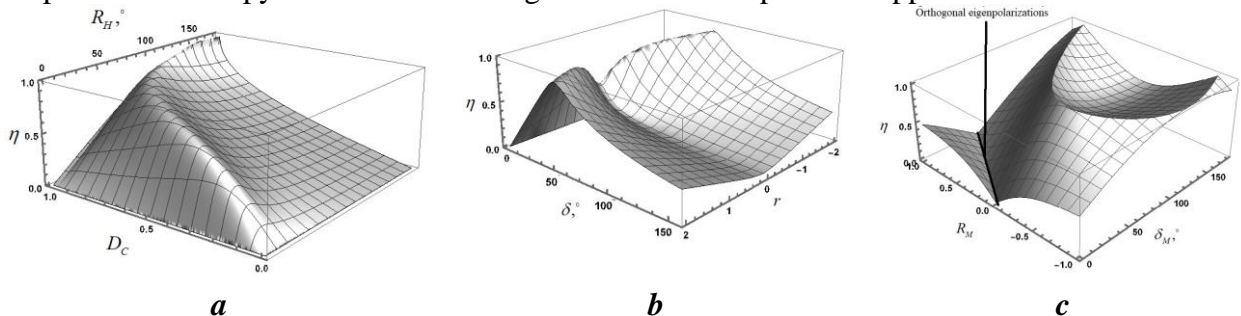
# COMPARISON OF THE ANISOTROPIC MEDIA POLARIZATION PROPERTIES IN TERMS OF THE HOMOGENEOUS AND MULTIPLICATIVE APPROACH

**Roman Kurylenko, Ivan Kolomiets**

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 64/13, Volodymyrska Street,  
City of Kyiv, Ukraine, 01601, romanyson@gmail.com

To describe the interaction of light with different types of anisotropic media the Jones matrix method [1, 2] is widely used in polarimetry. In terms of this method, the interaction of light with the anisotropic medium describes by relation  $\mathbf{E}_{out} = \mathbf{T}\mathbf{E}_{inp}$  where  $\mathbf{E}_{out}$ ,  $\mathbf{E}_{inp}$  - Jones vectors of output and input light which describe polarizations properties of light, and  $\mathbf{T}$  - Jones matrixes which describe anisotropic properties of the medium. To describe the polarization properties of media with complex anisotropy based on the Jones matrix methods several models exist: the homogeneous model which is based on the differential Jones Matrix [3], multiplicative model consists of the model based on the General equivalence theorem [4], and model based on polar decomposition theorem [5].

To compare the polarization properties of media characterized by several anisotropy types, it is convenient to use the medium inhomogeneity parameter  $\eta$  [5]. For example, Fig. 1 shows the dependence of the inhomogeneity parameter on the parameters of the medium anisotropy for the class of media with linear phase, linear, amplitude, and circular amplitude anisotropy in terms of a homogeneous and multiplicative approach.



*Fig. 1 Dependence of the inhomogeneity parameter on the anisotropy parameters for a class of media with linear amplitude linear phase and circular amplitude anisotropy in terms of (a) polar decomposition theorem approach, (b) homogeneous approach, (c) general equivalence theorem approach.*

Fig. 1 demonstrates a fact that in a class of media with three types of anisotropy, orthogonal eigenpolarizations can be implemented only in terms of the approach based on the generalized equivalence theorem. Also, the analysis based on the inhomogeneity parameter in terms of approaches this work allowed us to show that in other classes of media with two, three, or all four types of anisotropy, different approaches can lead to completely different results, which indicates the physical non-equivalence of these approaches.

[1] R.M.A. Azzam and N.M. Bashara, Ellipsometry and Polarized Light, Elsevier (1987).

[2] H.G. Tompkins, E.A. Irene, Handbook of Ellipsometry, Heidelberg: Springer (2005).

[3] R.M.A. Azzam, J. Opt. Soc. Am., **68**, 1756-1767, (1979).

[4] S. N. Savenkov, V.V. Marienko, E.A. Oberemok, O.I. Sydoruk, Phys. Rev. E, **74**, 1-8, (2006).

[5] S.Y. Lu, R.A. Chipman, J. Opt. Soc. Am. A, **13**, 1106-1113, (1996).



---

---

# FORMATION OF QUADRUPLE GAUSSIAN BREATHER OPTICAL SOLITONS IN DIFFRACTION MANAGED NONLINEAR MEDIA: EFFECT OF CUBIC QUINTIC OPTICAL NONLINEARITY

**Naveen Gupta**

Lovely Professional University Phagwara, naveens222@rediffmail.com

This paper presents theoretical investigation on formation of quadruple Gaussian (Q.G) breather solitons in diffraction managed optical media. The optical nonlinearity of the medium has been modeled by cubic-quintic nonlinearity. To obtain the physical insight into the propagation dynamics of the laser beam semi analytical solution of the wave equation for the laser beam has been obtained by using moment theory approach in W.K.B approximation. Emphasis is put on investigating evolutions of transverse dimensions and axial phase of the optical beam. Existence of stable spatial optical solitons resulting as a consequence of dynamic balance of diffraction broadening by Kerr effect induced self-focusing also has been investigated.





## ПРО ІЗОТРОПНІ ТОЧКИ У КРИСТАЛАХ $\text{Rb}_2\text{SO}_4$

**Іван Пришко<sup>1</sup>, Василь Стадник<sup>1</sup>, Назар Фтомин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Львівський національний університет імені Івана Франка, фізичний факультет, вул. Драгоманова 19, 79005, Львів, Україна  
pryshko\_ivan@ukr.net

Ізотропна точка (ІТ) є результатом підвищення симетрії оптичної індикатриси у разі зміни спектрального діапазону чи температури. Раніше під час досліджень температурних (77-1000 К) та спектральних (300-700 нм) залежностей показників заломлення  $n_i$  і двопронезаломлення  $\Delta n_i$ , вдалось виявити ІТ в низці діелектричних кристалів-фероїків групи  $\text{ABSO}_4$  ( $\text{LiKSO}_4$ ,  $\text{K}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{RbNH}_4\text{SO}_4$ ,  $\text{RbKSO}_4$ ,  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$ ). Однак в літературі відсутні відомості про оптико-спектральні параметри кристала сульфату рубідію  $\text{Rb}_2\text{SO}_4$  (СР) в ділянці низьких температур.

Досліджувані кристали отримано методом повільного випаровування за кімнатної температури водного розчину солей чистого сульфату рубідію  $\text{Rb}_2\text{SO}_4$ . Двопронезаломлення  $\Delta n_i$  досліджували спектральним методом, а показники заломлення – інтерференційним методом Обреїмова. На рис. 1 наведено температурні залежності показників заломлення  $n_i$  кристалу  $\text{Rb}_2\text{SO}_4$  для різних кристалофізичних напрямів для довжини світлової хвилі  $\lambda = 500$  нм у температурному діапазоні 77...300 К. Бачимо, що всі залежності  $n_i(T)$  майже нелінійно зростають зі зростанням температури, причому  $|dn_z/dT| > |dn_x/dT| \geq |dn_y/dT|$ . За кімнатної температури для  $\lambda = 500$  нм виявлено перетин кривих  $n_z(T)$  і  $n_y(T)$ . За температури 85 К виявлено перетин кривих  $n_z(T)$  і  $n_x(T)$  ( $n_z = n_x = 1,51938$ ). Це є друга ізотропна точка кристалу СР ІТ<sub>2</sub>.

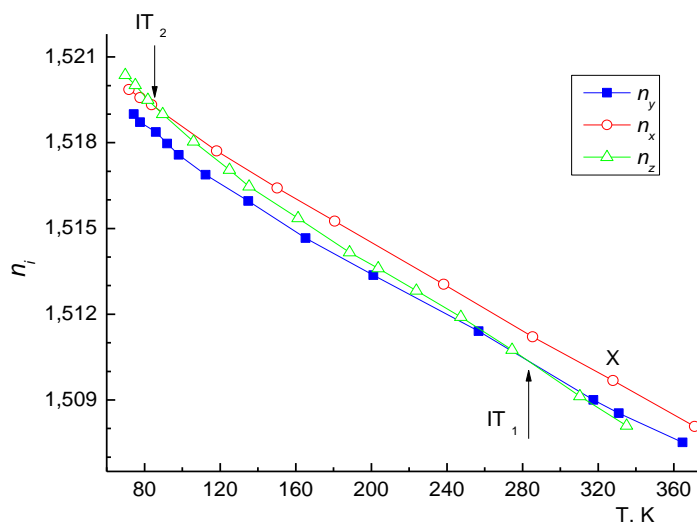


Рис. 1. Температурні залежності показників заломлення  $n_i$  кристалу  $\text{Rb}_2\text{SO}_4$  для різних кристалофізичних напрямів для довжини світлової хвилі  $\lambda = 500$  нм.

Для Y-напрямку виявлено незначну дисперсію  $d(\Delta n_y)/d\lambda \sim 2,8 \cdot 10^{-7} \text{ нм}^{-1}$  для довжини світлової хвилі  $\lambda_0 = 500$  нм і кімнатної температури. З підвищенням температури  $\Delta n_y$  зростає, при тому характер дисперсії не змінюється, лише зменшується за абсолютною величиною  $d(\Delta n_y)/d\lambda \sim 0,9 \cdot 10^{-8} \text{ нм}^{-1}$ , а за температури 85,5 К величина  $\Delta n_y = 0$ .



# **ELECTRON ACCELETAION BY LASER DRIVEN ELECTRON PLASMA WAVE IN PLASMA WITH DENSITY RAMP: COSH GAUSSIAN LASER BEAM**

**Rohit Johari and Naveen Gupta**

Lovely Professional University Phagwara, rotehanste@yahoo.com

This paper presents a theoretical study on nonlinear propagation of Cosh-Gaussian (ChG) laser beam in axially inhomogeneous plasma by considering the relativistic mass nonlinearity of plasma electrons under the effect of laser beam. The study is then extended to investigate the effect of self focusing on excitation of electron plasma wave (EPW). Variational theory has been used to obtain semi analytical solutions of the nonlinear wave equations of laser beam and EPW. Finally, the acceleration of electrons trapped in excited EPW has been investigated. The results obtained from numerical analysis reveal a stronger self-focusing of the Cosh-Gaussian laser beam for optimized values of decentered parameter, which is desirable to excite a large amplitude electron plasma wave (EPW) for acceleration of electrons by extending the interaction length.



# **STIMULATED RAMAN SCATTERING OF SELF FOCUSED LAGUERRE GAUSSIAN LASER BEAMS IN AXIALLY INHOMOGENEOUS PLASMA**

**Alex AK, Naveen Gupta**

Lovely Professional University  
Email: achenkunjalex@gmail.com

This paper presents a theoretical investigation on stimulated Raman scattering (SRS) of intense laguerre-Gaussian (LG) laser beams propagating through plasma with axial density ramp. The optical nonlinearity of the plasma has been considered to be originating due the ponderomotive force acting on the plasma electrons due to intensity gradient over the cross section of laser beam. An intense laser beam with frequency  $\omega_0$  propagating through plasma gets coupled with a preexisting electron plasma wave (EPW) at frequency  $\omega_{ep}$  and produces a back scattered wave at frequency  $\omega_s = \omega_0 - \omega_{ep}$ . Using variational theory semi analytical solution of the set of coupled wave equations for the pump, EPW and scattered wave has been obtained under W.K.B approximation. It has been observed that power of the scattered wave is significantly affected by the self-focusing effect of pump beam.



## BOSE-EINSTEIN CONDENSATE

Anchit Sinha

Department of Physics, Lovely Professional University, Phagwara, Punjab  
144411, India

Bose-Einstein Condensate is a unique state of matter which was theoretically proposed by Satyendra Nath Bose and Albert Einstein. In 1924, Bose introduced his idea on how to correctly predict the distribution for a cloud of indistinguishable light quanta, also known as photons. A year later, in 1925, Einstein generalized the Bose statistics to a dilute quantum cloud of particles. He suggested that when the temperature of a system of this cloud is decreased well below one Kelvin, the particles which were distinguishable at ordinary temperatures, settle into a single lowest possible energy state and form a super-atom with single wave function. For the first time in 1995, BEC was created with the help of laser cooling and laser trapping. It was done in the dilute gas of alkali rubidium atoms at a temperature of 100 billionths of a Kelvin. In this poster, the theoretical review of BEC phenomenon along with brief description of the 1995 JILA experiment is shown.

### Reference list:

- [1] N. Kumar, Bose-Einstein Condensation: Where many becomes one and so there is plenty of room at the bottom, *Current Science*, Vol. 89, No. 12 2005, pp. 2093-2100.
- [2] N. P. Proukakis, K. Burnett, *Theory of Bose-Einstein Condensation for Trapped Atoms*, *Philosophical Transactions: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. 355, No. 1733 1997, pp. 2235-2245.
- [3] C. J. Pethick, H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, 2<sup>nd</sup> ed., 2008.
- [4] E. A. Cornell, C. E Wieman, *The Bose-Einstein Condensate*, *Scientific American*, Vol. 278, No. 3, 1998, pp. 40-45.



## STIMULATED RAMAN SCATTERING OF SELF FOCUSED ELLIPTICAL $q$ -GAUSSIAN LASER BEAM IN PLASMA: EFFECT OF DENSITY RAMP

**Sanjeev Kumar<sup>1,2</sup>, Naveen Gupta<sup>1</sup>, S. B. Bhardwaj<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Lovely Professional University, Phagwara, Punjab, India

<sup>2</sup>Government College for Women, Karnal, Haryana, India

<sup>3</sup>SUS Govt. College, Matak-Majri, Indri, Karnal, Haryana, India

e-mail: [skpanwar82@gmail.com](mailto:skpanwar82@gmail.com)

Theoretical investigation of stimulated Raman scattering (SRS) of self focused elliptical  $q$ -Gaussian laser beam propagating through underdense plasma targets under the effect of density ramp, has been presented in this paper. Ponderomotive force becomes active when an intense  $q$ -Gaussian laser beam interacts nonlinearly with plasma. The laser beam gets coupled with a preexisting electron plasma wave (EPW) due to this ponderomotive nonlinearity of plasma. Under W.K.B approximation technique, semi-analytical solution of the set of coupled nonlinear wave equations for the three waves (pump, EPW and scattered) has been obtained by using variational theory.

[1] A. Sharma, I. Kourakis, *Laser Part. Beams* 28, 479 (2010).

[2] A. Singh, K. Walia, *Appl. Phys. B* 101, 617 (2010).

[3] P. Sharma, K. Avinash, D.N. Gupta, *Phys. Plasmas* 23, 102704 (2016).

[4] N. Gupta, *Laser Part. Beams* 37, 184 (2019).

[5] N. Gupta, *Cont. Plasma Phys.* 59, 154 (2019).

[6] N. Gupta, S. Kumar, *Laser Phys.* 30, 066003 (2020).

[7] O. Kamboj, A. H. Ali, N. Kant, *Optical and Quantum Electronics* 54, 539 (2022).



## FREQUENCY DOUBLING OF $q$ GAUSSIAN LASER BEAM IN PLASMAS

**Siddhanth Shishodia & Naveen Gupta**

Lovely Professional University, Jalandhar Punjab India,  
shishodiasid0014@gmail.com

A scheme for second-harmonic generation (SHG) of a pair of  $q$ -Gaussian laser beams interacting nonlinearly with underdense plasma has been proposed. Due to the relativistic increase in electron mass under the intense fields of the laser beam, the resulting optical nonlinearity of plasma leads cross focusing of the laser beams. The resulting nonlinear coupling between the two laser beams makes the oscillations of plasma electrons to contain a frequency component equal to the sum of frequencies of the pump beams. This results in a nonlinear current density at frequency equal to the sum of frequencies of the pump beams. If the frequencies of the pump beams are equal, then the resulting nonlinear current generates a new radiation at frequency twice the frequencies of the pump beams a phenomenon known as SHG. Starting from nonlinear Schrodinger wave equation a set of coupled differential equations governing the evolution of beam widths of the laser beams and power of generated second-harmonic radiation with longitudinal distance has been obtained with the help of variational theory. The equations so obtained have been solved numerically to envision the effect of laser as well as plasma parameters on the power of generated second-harmonic radiation.

- [1] Seres, Jozsef. (2005) et al. Source of Coherent kiloelectronvolt X rays. Nature 433.7026.
- [2] Milton., and Edward (2009) j. et al Progress in field spectroscopy. Remote sensing of Environment 113.
- [3] Campion, Alan, And Patanjali K. (1998) Surface-enhanced Raman Scattering. Chemical society reviews 27.4. P No. 241-250.
- [4] Mikhailov, V. (2007) et al. Dispersing light with surface plasmon polaritonic crystals. Phy. Rev. let. 99.8.
- [5] Zhao, Yufei. (2011) et al. A family of visible-light responsive photocatalysts obtained by dispersing CrO<sub>6</sub> octahedra into a hydrotalcite matrix. Chem- A European Journal 17.47.



## SELF FOCUSING OF LASER IN PLASMA: EFFECT OF BEAM INTENSITY ON LASER BEAM WIDTH

**Suman Choudhry<sup>1,2</sup>, Naveen Gupta<sup>1</sup>, S. B. Bhardwaj<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Lovely Professional University, Phagwara, Punjab India

<sup>2</sup>Government College for Women, Karnal, Haryana, India

<sup>3</sup>SUS Govt. College, Matak-Majri, Indri, Karnal, Haryana, India

e-mail: [sumanchoudhary242@gmail.com](mailto:sumanchoudhary242@gmail.com)

Propagation dynamics of intense laser beam inside plasma has been investigated using Variational Theory. Ordinary differential equation for the laser beam width has been solved Runge-Kutta fourth-order method. The spot size of laser beam varies harmonically with the propagation distance inside plasma due to competition between the two phenomena diffraction and nonlinear refraction. Self focusing is increased with increase in initial beam intensity of laser and also it becomes faster.

- [1] R. S. Craxton, K. S. Anderson, and T. R. Boehly, *Phys. Plasmas*, 22, 110501 (2015).
- [2] K. A. Tanaka, B. Boswell, R. S. Craxton, et al., *Phys. Fluids*, 28, 2910 (1985).
- [3] A. B. Bud'ko and M. A. Liberman, *Phys. Fluids B*, 4, 3499 (1992).
- [4] R. Betti, V. N. Goncharov, R. L. McCrory, and C. P. Verdon, *Phys. Plasmas*, 5, 1446 (1998).
- [5] J. Myatt, A. V. Maximov, W. Seka, et al., *Phys. Plasmas*, 11, 3394 (2004).



## **ВОЛОКОННО-ОПТИЧНІ ДЖЕРЕЛА ЛАЗЕРНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ ЯК ОСНОВА ПРОТИДРОННОЇ ЛАЗЕРНОЇ ЗБРОЇ**

**Євген Світличний**

Інститут Електронної Фізики НАН України, вул. Університетська 21

Ужгород, 88017

E-mail:bercheni14@gmail.com

Створення сучасних, ефективних засобів протиповітряної оборони (ППО) є актуальною задачею.

Розробка потужних лазерних систем сприяє інтеграції лазерних технологій в систему оборони України. Найбільше військових цікавить застосування лазерів як засобу (ППО). Одним з перших завдань, поставлених перед розробниками лазерів, стала ефективна боротьба з усіма типами повітряних дронів, зі стратегічною зброєю масового ураження боєголовками балістичних ракет, а згодом із самими ракетами в активній фазі польоту, оскільки на даний час саме для цих цілей взагалі не існує альтернативних засобів протидії окрім зенітно-ракетних комплексів. [1]

Серед всіх типів лазерів які використовуються в сучасних системах ППО домінуючі позиції займають волоконні лазери. У порівнянні з лазерами інших конструкцій волоконні лазери володіють такими важливими достоїнствами для практичного застосування, як: просте збільшення потужності, ефективне охолодження, велика надійність, низькі витрати на обслуговування. Цікавим моментом в застосуванні волоконних лазерів в основі ППО є можливість використання існуючих промислових волоконних лазерів, які через можливість генерації різних довжин хвиль, широко використовуються в промислових умовах для різання, маркування, зварювання, очищення, текстурування, свердління та багато іншого.

[1] Є.А. Світличний, тези, Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРИКА-2022, Львів (2022), с. В2.





## ЕЛЕКТРОННА ЕНЕРГЕТИЧНА СТРУКТУРА КРИСТАЛІВ CsPbCl<sub>3</sub>:Ce

**Музика Т.М., Ставарський О.В., Чернодольський Я.М.**

Львівський національний університет імені Івана Франка,  
фізичний факультет, вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна,  
[chornodolsky@gmail.com](mailto:chornodolsky@gmail.com)

Сьогодні велика увага світових науковців приділена створенню електронних пристроїв, таких як світлодіоди та сонячні батареї. Через низьку вартість і простоту застосування неорганічні та органічно-неорганічні перовськіти займають свою особливу нішу. Значна кількість перовскітів характеризується високим оптичним поглинанням сонячного світла без використання світлозахоплюючих структур [1]. Методами фотоелектронної спектроскопії можна проводити дослідження енергетичних рівнів і будувати схеми оптичних переходів перовскітів різного складу [2]. Ширина забороненої зони даних матеріалів може варіюватися від 1,1 до 3,1 еВ, що є добре для елементів фотовольтаїки, особливо для батарей з паралельним поділом спектра [3]. Щоб збільшити ефективність сонячної батареї необхідно знати всі ті параметри які впливають на ширину забороненої зони.

Галогеніди свинцю цезію CsPbX<sub>3</sub> (X = F, Cl, Br, I) мають перовскітну структуру. Більшість цих матеріалів є напівпровідниками, які поглинають видиме та ультрафіолетове випромінювання. На даний час актуальною задачею є вивчення структурних, електронних та оптичних властивостей таких матеріалів.

В даній роботі досліджувались кристали CsPbCl<sub>3</sub>:Ce з кубічною кристалічною ґраткою ( $a = 5,605 \text{ \AA}$ ) з просторовою групою Rm3m. Проведено розрахунок з використанням методу проєкційних приєднаних хвиль, враховуючи градієнтні поправки до обмінно-кореляційної енергії. Обрахунки здійснювались за енергії обрізання біля 40 Ha, при енергії обрізання сітки PAW в околі 120 Ha, для сітки в  $k$  просторі розміром  $7 \times 7 \times 7$ . Зонна структура кристала CsPbCl<sub>3</sub>:Ce розраховувалась за такими напрямками зони Брілюена: X-R, R-M, M-Г, Г-R. Валентна зона розташована в області від -4,5 еВ до 0 еВ і формується 3p станами Cl. Основний внесок у дно зони провідності дають 6p стани Pb. Отримано значення ширини забороненої зони  $E_g = 2,27 \text{ eV}$ , яке є близьким до експериментального 3,0 еВ, що свідчить про доцільність використання даного методу для розрахунку електронної енергетичної структури перовскітів.

[1] T.B. Song, J. Mater. Chem. A, **3**, 17 (2015).

[2] S. Yamanaka, J. Appl. Phys., **123**, 16 (2018).

[3] N.J. Jeon, Nature, 517, 7535, (2015).



## ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІВ $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ ЛЕГОВАНИХ Nd, Dy, Er, Lu

**Тарас Мельничук<sup>1</sup>, Галина Мирончук<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Волинський національний університет ім. Лесі Українки, пр. Волі, 13,  
Луцьк, Волинська область, Україна, 43025

Проблема отримання матеріалів з низькою симетрією структури з низьким коефіцієнтом поглинання світла в широкому спектральному діапазоні електромагнітного випромінювання є актуальною в сучасній оптоелектроніці та нелінійній оптиці. Було проведено низку досліджень для вивчення впливу катіонного та аніонного заміщення в структурі  $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$  на оптичні, фотоелектричні та нелінійно-оптичні властивості [1-3]. Важливо вивчити вплив домішок рідкоземельних металів на оптичні властивості, оскільки, можливо, вони можуть локалізуватися в положеннях Ag і модифікувати оптичні спектри. У цій роботі досліджено вплив домішок сплаву R (R - Nd, Dy, Er і Lu) на оптичні властивості  $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ . Характерним для цієї структури є статичний розподіл катіонів Ag, Nd/Dy/Er/Lu уздовж вузлів кристалічної решітки та наявність нестехіометричних вакансій атомів Ag у сполуці  $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8 - \text{Ag} (V_{\text{Ag}})$ .

Адже, міжатомні відстані R-S знаходяться між 2,7 - 2,9 Å, вони можуть займати кристалографічне положення атомів Ag 16b і утворювати тверді розчини  $\text{Ag}_{1-3x}\text{R}_x\text{GaGe}_3\text{Se}_8$  в результаті ізоелектронного гетероатомного заміщення.

Одним з найважливіших параметрів напівпровідників, від якого залежать їх оптичні властивості, є ширина забороненої зони. Для оцінки ширини забороненої зони було проведено дослідження спектрального розподілу коефіцієнта поглинання в області краю власної смуги поглинання.

Виходячи з експериментальних результатів  $E_U$  визначена як  $E_U = \Delta(h\nu) / \Delta(\ln \alpha)$  становить 95, 91, 98, 87 meV для  $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Nd}$ ;  $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$ ;  $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Er}$ ;  $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Lu}$  відповідно. Потрібно відзначити, що при вимірюванні спектрів поглинання ми не отримали значення  $\alpha > 1000 \text{ cm}^{-1}$ . Так, як використати метод Тауца для розрахунку  $E_g$  не вдалось використати. Приблизне значення ширини забороненої зони розраховувалось використовуючи правило Урбаха за співвідношенням  $E_g = E_0 + E_U \ln(1000/\alpha_0)$ . Оцінка ширини забороненої зони при  $a = 200 \text{ cm}^{-1}$  дала отримати наступні результати: 2,21 eV, 2,23 eV, 2,25 eV, 2,26 eV для  $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Nd}$ ,  $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$ ,  $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Er}$ ,  $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Lu}$  відповідно.

Ми вважаємо, що зменшення ширини забороненої зони наших сполук пов'язано з знаком різниць іонних радіусів компонент сполуки та заміщуючого іона ( $\text{Nd}^{+3}(0.099 \text{ nm}) \rightarrow \text{Ag}^+(0.113 \text{ nm})$ ;  $\text{Dy}^{+3}(0.088 \text{ nm}) \rightarrow \text{Ag}^+(0.113 \text{ nm})$ ;  $\text{Er}^{+3}(0.085 \text{ nm}) \rightarrow \text{Ag}^+(0.113 \text{ nm})$ ;  $\text{Lu}^{+3}(0.080 \text{ nm}) \rightarrow \text{Ag}^+(0.113 \text{ nm})$ ). Також, на зміну ширини забороненої зони може впливати точкові дефекти вакансійного та міжвузлового типів.

[1] Krymus A.S., Myronchuk G.L., Parasyuk O.V., Lakshminarayana G., Fedorchuk A.O., El-Naggar A., Albassam A. and Kityk I.V. Photoconductivity and nonlinear optical features of novel  $\text{Ag}_x\text{Ga}_x\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_2$  crystals. Mater. Res. Bull. 2017. Vol. 85. P. 74-79.

[2] Kityk I.V., Myronchuk G.L., Parasyuk O.V., Krymus A.S., Rakus P., El-Naggar A.M., Albassam A.A., Lakshminarayana G., Fedorchuk A.O. Specific features of photoconductivity and photoinduced piezoelectricity in  $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$  doped crystals. Optical Materials. 2017. Vol.63. P. 197-206.

[3] V. Badikov, K. Mitin, F. Noack, V. Panyutin, V. Petrov, A. Seryogin, G. Shevyrdayeva. Orthorhombic nonlinear crystals of  $\text{Ag}_x\text{Ga}_x\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_2$  for the mid-infrared spectral range. Opt. Mater. 2009. 590-597.



## СТРУКТУРА ТА ОСОБЛИВОСТІ ЕЛЕКТРОННОГО СПЕКТРУ КРИСТАЛА $(\text{NH}_4)_3\text{ZnCl}_5$

**А.О. Шаправський, М.Я. Рудиш, Р.С. Брезвін, В.Й. Стадник,  
П.А. Щепанський**

Львівський національний університет імені Івана Франка, фізичний факультет, вул. Кирила і Мефодія 8, 79005, Львів, Україна,  
e-mail: rudysh.myron@gmail.com

В роботі проведено синтез кристала  $(\text{NH}_4)_3\text{ZnCl}_5$  використовуючи метод повільного випаровування з розчину. Ріст кристалів проводився за кімнатної температури з водного розчину відповідних солей використовуючи спонтанно утворені затравки. Синтезовані кристали мають форму пластинок з чітко вираженою кристалічною огранкою. Структура кристала досліджувалась за допомогою методу X-променевої дифракції на порошкових зразках. Дослідження показали, що кристал є однофазним. Отримано параметри кристалічної ґратки та координати атомів. Уточнені параметри елементарної комірки становлять  $a = 8.7212(2)$ ,  $b = 9.8924(3)$ ,  $c = 12.6405(3)$  Å, а об'єм елементарної комірки  $V = 1090.54(5)$  Å<sup>3</sup>; Однорідність та якість кристала додатково перевіряли оптичними методами.

За допомогою методу теорії функціоналу густини (density functional theory – DFT) проведено розрахунок зонно-енергетичної структури та інших властивостей кристала  $(\text{NH}_4)_3\text{ZnCl}_5$ . Для опису обмінно-кореляційної енергії використано узагальнене градієнтне наближення, а взаємодія остова атома з валентними електронами описувалася за допомогою ультрам'якого псевдопотенціалу. Інтегрування проводилось по першій зоні Бріллюена.

Отримано зонно-енергетичну структуру досліджуваного кристалу в точках високої симетрії і вздовж ліній що їх з'єднують а також проведено її аналіз. З'ясовано походження електронних рівнів використовуючи спектри повної та парціальної густини електронних станів. Оцінено характеристики хімічного зв'язку за допомогою просторового розподілу електронної густини та розрахованих атомних зарядів. З'ясовано особливості формування краю фундаментального поглинання. Вперше отримано оптичні спектри кристала та оцінено їх анізотропію.

**ЗОННА СТРУКТУРА КРИСТАЛІВ CsPbCl<sub>3</sub>:Cd****Підгорний О.О., Кононюк С.О., Чернодольський Я.М.**

Львівський національний університет імені Івана Франка,  
фізичний факультет, вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна,  
[chornodolsky@gmail.com](mailto:chornodolsky@gmail.com)

Протягом останніх десятиліть докладалися великі зусилля до дослідження УФ люмінесцентних матеріалів, які мають життєво важливе значення завдяки широкому застосуванню в області світлодіодів, стерилізації води та медикаментозній терапії [1, 2]. В основному дослідження ультрафіолетових джерел світла були пов'язані з матеріалами AlGaN і ZnO [3-6]. Дані матеріали виготовляються доволі складно і з використанням дорогого обладнання. Таким чином, існує велика потреба у розробці простих методів синтезу матеріалів, які виявляють чудові люмінесцентні властивості. Неорганічні кристали галогеніди свинцю цезію (CsPbX<sub>3</sub>, X = Cl, Br, I) характеризуються відмінними оптоелектронними властивостями такі як: велика відстань дифузії носіїв, великий коефіцієнт поглинання, високий квантовий вихід фотолюмінесценції, вузька смуга випромінювання та регульована заборонена зона [7].

Останнім часом нанокристалічні перовськіти CsPbCl<sub>3</sub>:Cd з інтенсивною люмінесценцією знаходять інноваційні фотоелектричні застосування: перетворювачі та підсилювачі кольору, для твердотільних світильників. В порівнянні з звичними рідкісноземельними люмінофорами або органічними полімерами і фарбами, нанокристалічні структури часто показують суттєво вищу квантову ефективність. Крім того, завдяки можливості зміни розміру кристалу можуть змінювати емісійні положення піків, що дозволяє створювати більш насичені кольори.

В даній роботі проведено теоретичні дослідження електронної енергетичної структури кристала CsPbCl<sub>3</sub>:Cd. Валентна зона кристала утворена галогенними станами 3pCl, нижня частина зони провідності утворена бр-станами іонів Pb та 5s-станами Cd. Отримані результати добре узгоджуються з результатами експериментальних досліджень, де підтверджується збільшення ширини забороненої зони кристала CsPbCl<sub>3</sub>:Cd із збільшенням легуючої домішки Cd<sup>2+</sup>.

[1] M. Kneissl, Nat. Photonics, **13**, 233 (2019).

[2] H. D. Sun, Adv. Funct. Mater., **29**, 1905445 (2019).

[3] Y. Li, J. Mater. Chem. C, **8**, 883 (2020).

[4] Y. Harada, J. Lumin., **87**, 405 (2000).

[5] B. Abdollahi Nejand, Adv. Energy Mater., **10**, 1902583 (2020).

[6] K. Bando, J. Lumin., **108**, 385 (2004).

[7] L. Protesescu, Nano Lett., **15**, 3692 (2015).



## РЕФРАКТИВНІ ПАРАМЕТРИ КРИСТАЛІВ СУЛЬФАТУ КАЛІЮ З ДОМІШКОЮ МАНГАНУ

Павло Щепанський<sup>1</sup>, Орест Штука<sup>1</sup>, Василь Стадник<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Львівський національний університет імені Івана Франка, фізичний факультет, вул. Драгоманова 19, 79005, Львів, Україна  
Pavlo.shchepanskyi@lnu.edu.ua

Введення домішок заміщення чи вплив зовнішньої взаємодії (електромагнітні поля, механічне стискання, X-опромінення тощо) є одним із найефективніших методів зміни оптичних і діелектричних властивостей кристалів. Це дозволяє розширити області практичного застосування кристалів у ролі кристалооптичних датчиків.

У цій роботі досліджено вплив домішки мангану на рефрактивні та діелектричні властивості кристали сульфату калію. Вони цікаві тим, що володіють двома ізотропними точками, які досить чутливі до змін температури та дії одновісного навантаження, що робить їх цікавим об'єктом для дослідження.

Зразки  $K_2SO_4$  з домішкою Mn для досліджень отримані шляхом вирощування із водного розчину методом повільного випаровування розчинника за заданих умов. Вихідними реагентами слугували хімічно чисті солі сульфату калію ( $K_2SO_4$ ) та кристалогідрату сульфату мангану ( $MnSO_4 \cdot 5H_2O$ ). Упродовж 20-30 діб отримано зразки хорошої оптичної якості, а також мали добре розвинуту кристалографічну огранку у вигляді видовженої призми та приблизними розмірами  $7 \times 8 \times 9$  мм.

З метою ідентифікації структури та визначення концентрації домішок у кристалах СК проведено аналіз рентгенівської дифракції (XRPD) на заздалегідь підготовлених зразках у вигляді порошку. Отримані кристали  $K_{1.95}\{Mn_{-0.025}\}SO_4$  можна розглядати як результат кратного (два атоми калію на один атом міді) гетеровалентного заміщення атомів  $2K^+$  на  $Mn^{2+}$  в структурі сполуки  $K_2MnSO_4$ . Структуру сполуки  $K_{1.95}\{Mn_{-0.025}\}SO_4$  можна представити як укладання колон з тетраєдрів  $SO_4^{2-}$  вздовж напрямку  $[0\ Y\ 0]$ . Атоми K утворюють зигзагоподібні ланцюги в проміжку між цими колонами. В такому представленні атоми міді розташовані в ланцюгах з металічного компонента.

Дослідження дисперсії показників заломлення, проведене імерсійним методом Обреїмова, показало, що у спектральному діапазоні 300-700 нм дисперсія є нормальною і різко зростає з наближенням до краю поглинання. Введення домішки іонів  $Mn^{2+}$  призводить до загального зменшення значень показників заломлення  $n_i$  для трьох кристалофізичних напрямів. Для домішкових кристалів залишаються справедливими співвідношення для показників заломлення  $n_z > n_x > n_y$  та дисперсії  $dn_z/d\lambda > dn_x/d\lambda > dn_y/d\lambda$ , що й для чистих кристалів.

На основі експериментальних результатів з використанням дисперсійної формули Зельмеєра та формули Лорентц-Лорентца, розраховано кристалооптичні параметри кристалів СК з домішкою іонів  $Mn^{2+}$ . Виявлено, що введення домішки спричиняє зсув положення центрів ультрафіолетових осциляторів у довгохвильову ділянку спектру і зменшує силу відповідних осциляторів. Також дещо меншою є величина молярної рефракції і електронної поляризованості.



## ГІДРОДИНАМІЧНІ РАДІУСИ НЕОДНОРІДНОСТЕЙ ВОДНИХ РОЗЧИНІВ СИРОВАТКОВОГО АЛЬБУМІНУ ЛЮДИНИ В ОКОЛІ ХАРАКТЕРНИХ КОНЦЕНТРАЦІЙ

Наталя Фудулей

ОНУ імені І.І. Мечникова, Дворянська 2, м. Одеса, [nata.fudulei@gmail.com](mailto:nata.fudulei@gmail.com)

Методи динамічного розсіяння світла на протязі п'яти останніх десятиріч широко використовуються у дослідженнях з зовсім різними масштабами – від руху потоків у турбінах до руху крові у судинах ока. Одним з потужних методів є лазерна кореляційна спектроскопія (ЛКС), яка дозволяє при молекулярному розсіянні світла визначати гідродинамічні радіуси частинок (у томи числі і біологічного походження), що рухаються [1]. Нами використовується корелометр розроблений у ОНУ імені І.І.Мечникова, який будує нормовану часову кореляційну функцію інтенсивності розсіяного світла (РС)  $I$  у гауссовому наближенні  $g^{(2)}(\tau) = \langle I(0)I(\tau) \rangle / \langle I^2 \rangle = a + b |g^{(1)}|^2 = a + b e^{-2D_r q^2 \tau}$ , де  $a$  і  $b$  – константи,  $q$  – хвильовий вектор розсіяння, а  $D_r = \frac{k_B T}{6\pi\eta r}$  – коефіцієнт дифузії за формулою Стокса-Ейнштейна (тут  $\eta$  - коефіцієнт в'язкості,  $r$  – гідродинамічний радіус частинок).

Попередні дослідження показали, що нативна середня плазма крові людини при її розбавленні демонструє зміни властиві фазовим переходам за концентрацію 0.9 від нативної, що збігається з емпіричною гематологічною границею при кровезаміщенні. Подальші дослідження відбувались з водними розчинами головного білкового компоненту – сироваткового альбуміну людини. За вихідні компоненти бралися вода для ін'єкцій, фізіологічний розчин та фармакологічна форма альбуміну 20% (200 мг/мл). Концентрація розчинів визначалась по співвідношенню об'ємів компонент, та становила  $C = 0.1 \div 0.01$  г/мл. Досліди показали, що характерні зміни показника  $pH$  припадають за температур від 15 до 40°C на концентрацію порядку 6 мг/мл, що співпадає з концентрацією білкового компоненту широкого спектру у нативній плазмі крові людини.

При визначенні методом ЛКС ми використовували відносний метод для виключення апаратних похибок з тестовими об'єктами – розчини фулерену  $C_{60}$  у бензолі та нанофлюїду  $Al_2O_3$  у ізопропанолі.

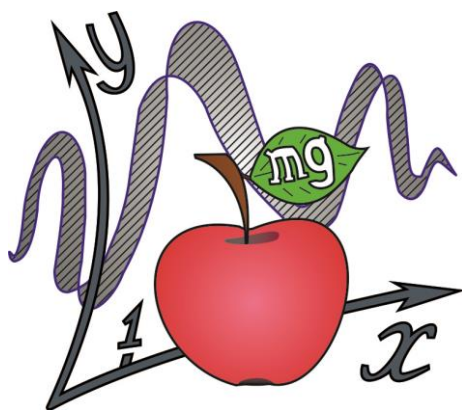
Отримано: а) у розчинах вода-альбумін спостерігається два характерних часи, які відрізняються на порядок. Розмір менших сумірний з характерним розміром поодинокі молекули альбуміну 30-80Å; б) більші характерні часи можуть бути пояснені як за рахунок асоціації з утворенням олігомерів, так і обертальною дифузією; в) з зростанням концентрації білкового компоненту характерні часи збільшуються, але за таких, що співпадають з характеристичною 5-6 мг/мл вони стрибком збільшуються майже вдвічі. Таким чином, підтверджено, що за характерних концентрацій у водних розчинах альбуміну проходять процеси, які можуть розглядатися як фазовий структурний перехід. Такі результати добре співвідносяться з [2].

[1] S. Magazù, G. Maisano, P. Migliardo, & V. Villari, in: The Journal of Chemical Physics **111(19)**, 9086–9092 (1999).

[2] O.V. Khorolskiy, N.P. Malomuzh in: AIMS Biophysics, **7(4)**, 219-235 (2020).







**СЕКЦІЯ С**

***НАНОМАТЕРІАЛИ ТА НАНОТЕХНОЛОГІЇ***

**SECTION C**

***NANOMATERIALS AND NANOTECHNOLOGY***



## SURFACE RUBBING TECHNOLOGY FOR OBTAINING GRAPHENE AND TWO-DIMENSIONAL MATERIALS AND STRUCTURES

<sup>1</sup>Levon Misakyan, <sup>2</sup>Areg Shmavonyan, <sup>1</sup>Gagik Shmavonyan

<sup>1</sup>National Polytechnic University of Armenia, 105 Teryan street, Yerevan, 0009, Armenia, e-mail: [g.shmavonyan@polytechnic.am](mailto:g.shmavonyan@polytechnic.am)

<sup>2</sup>Yerevan State University, 1 Alek Manukyan street, Yerevan, 0025, Armenia

An extremely simple, fast, cost-effective, transfer- and chemical-free, reliable and industrially scalable non-conventional rubbing method (substrates rubbing method) for obtaining high quality and large size mono- and few layer graphene, hexagonal boron nitride and other two-dimensional (2D) material nanostripes consisting of arrays of quantum dots, films and hybrid nanostructures consisting of nanostripes and/or films on different rigid and flexible inorganic and organic substrates with atomically flat or stepped (terraced) surfaces is suggested. 2D materials are obtained manually (homemade) or mechanically (for mass production) by rubbing graphite or other layered bulk materials on dielectric, semiconducting and metallic substrates at atmospheric pressure conditions. The combination of microscopic, spectroscopic and electrical characterization techniques, i.e. optical, atomic force (AFM), scanning electron (SEM) and high resolution transmission electron (HR-TEM) microscopy, ultraviolet (UV)–visible, fluorescence (PL), X-ray photoelectron (XPS) and Raman spectroscopy, X-ray diffraction (XRD) and I-V measurements reveal the mechanism of the formation of unique 2D material nanostripes and films consisting of the nanostripes on different substrates by defining the efficient rubbing conditions, as well as the requirements to both the substrates and material being rubbed (layered bulk powder, highly ordered pyrolytic graphite (HOPG), fullerene, nanotube) [1-4].

The suggested ecologically clean technology, in contrast to the conventional technologies [5, 6], drastically decreases the production cost and time, facilitating the making process and avoiding the use of chemicals, solutions and any device, thus paving the way to industrial-scale 2D material production and new applications in next generation ultrathin, lightweight flexible, hybrid and wearable electronics, as well as 2D material enhanced products.

- [1] Shmavonyan G.Sh., Vázquez Vázquez C., López-Quintela M.A. 5th International Colloids Conference: Surface Design and Engineering, Paper P067, June 21-24, 2015, Amsterdam, Netherlands.
- [2] López-Quintela M.A., Shmavonyan G.Sh., Vázquez Vázquez C., Patent No: ES 2575711 A1, Publication date: June 30, 2016, WO 2016/107942 A1.
- [3] Shmavonyan G., Hricovini K., Heckmann O., Boiakinov E., Ndiaye W., Vaiedelich S., Richter M.C. XPS analyses of as-rubbed mono- and few layer graphene films obtained by the substrates rubbing method, 3<sup>rd</sup> European Graphene Forum, April 26-28, 2017, Paris.
- [4] Shmavonyan G.Sh. The 4<sup>th</sup> Annual Conference on Optical Nanospectroscopy, March 28-31, 2017, Lisbon, Portugal.
- [5] Shmavonyan G.Sh., Mailian A.R., Mailian M.R., Vázquez Vázquez C., López-Quintela M.A. 4th International Colloids Conference: Surface Design and Engineering, Paper P3.07, June 15-18, 2014, Madrid, Spain.
- [6] Shmavonyan G., Mailian A., Mailian R. 10th International Conference on Nanosciences and Nanotechnologies (NN13), p. 280, July 9-12, 2013, Thessaloniki, Greece.



## ZINC OXIDE POROUS PLATE WITH MICRO- AND NANOELEMENTS AS EFFECTIVE PHOTOELECTROCATALYST

Lilia Hrytsak, Vladyslav Vasil'ev, Taras Kanarskyi, Borys Turko  
Ivan Franko National University of Lviv, Dragomanova Str., 50, Lviv, 79005  
e-mail: kanarskiytm@gmail.com

Azo dyes such as methyl orange (MO) are among the most important water pollutants due to their toxicity and discharge at large quantities from the textile, paper printing, residual dyestuffs, foodstuffs and pharmaceutical industries [1]. A promising method of water purification from organic dyes is photocatalysis and photoelectrocatalysis using semiconductor materials. ZnO is a promising material for photoelectrocatalysis due to its remarkable properties and it's the cheapest alternative to the currently most efficient photocatalyst – titanium dioxide [2].

The method of synthesis of the zinc oxide porous plate with micro- and nanoelements is described in detail in our previous work [2]. The obtained sample has microgranules with a diameter of about 10  $\mu\text{m}$  and aggregates of microgranules up to 30  $\mu\text{m}$  in diameter. The surfaces of the spherical microgranules are coated with microneedles with a length of about 10  $\mu\text{m}$ , with base and top diameters of about 1  $\mu\text{m}$  and 100 nm, respectively.

Photocatalytic, photoelectrocatalytic and electrocatalytic studies were carried out for those microstructures based on zinc oxide. The dye degradation efficiency  $E_{ef}$  was calculated by the formula [3]:

$$E_{ef} = \left[ C_0 - \frac{C(t)}{C_0} \right] \times 100\% = \left[ A_0^{465} - \frac{A_t^{465}}{A_0^{465}} \right] \times 100\% , \quad (1)$$

where  $C_0$  – is the starting dye concentration,  $C(t)$  – the dye concentration after UV-VIS irradiation for time  $t$ ,  $A_0^{465}$  and  $A_t^{465}$  – are the dye solution optical densities at 465 nm respectively before and after irradiation for time  $t$ .

The best values of efficiency of dye decomposition were obtained during photoelectrocatalysis – 66.67%, in comparison with photocatalysis (48.8%) and electrocatalysis (56.6%). The obtained graphical dependence is linear in the coordinates  $\ln[C(t)/C_0]$  on time, which corresponds to the first-order kinetics. The reaction rate constant  $k$ , determined from the slope of the  $C_r$  dye concentration versus time, is used to quantify the catalytic activity of the sample and was equals  $1.1 \cdot 10^{-2} \text{ sec}^{-1}$ ,  $6.6 \cdot 10^{-3}$  and  $6.5 \cdot 10^{-3}$  for photocatalysis, photoelectrocatalysis and electrocatalysis respectively.

These results showed that the use of photoelectrocatalysis by the zinc oxide porous plate with micro- and nanoelements is more effective for the degradation of the dye than for photocatalysis. Also, our catalyst had high catalytic activity and can be easily separated from the solution, which is important for commercial use.

- [1] R. Jain, M. Bhargava, N. Sharma, Ind. Eng. Chem. Res. **42**, 243 (2003).  
[2] L. Hrytsak, B. Turko, V. Vasil'yev, R. Serkiz, A. Kostruba, J. Phys. Stud, **26**, 3401 (2022).  
[3] L. Toporovska, B. Turko, V. Kapustianyuk, M. Rudko, J. Phys. Stud., **24**, 3701 (2020).



## ELECTROLUMINESCENCE FROM OLED BASED ON DCM DERIVATIVE WITH CHEMICAL FORMULA $C_{25}H_{21}N_3O_3$

Vladyslav Vasil'yev<sup>1</sup>, Borys Turko<sup>1</sup>, Ivan Karbovnyk<sup>1</sup>, Oleksii Kushnir<sup>1</sup>,  
Halyna Klym<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ivan Franko National University of Lviv, 1, Universytetska str., Lviv, 79000

<sup>2</sup>Lviv Polytechnic National University, Bandera str., 12, Lviv, 79013

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

One of the most widely studied organic compounds for manufacturing OLEDs are tris-(8-hydroxyquinoline)aluminum ( $Alq_3$ ), dicyanomethylenepyran (DCM) and its derivatives [1]. Since the DCM compound itself has a very low luminescence intensity due to significant intermolecular interaction that quenches the luminescence, a "guest–host" system is used, for example, such as  $Alq_3$ :DCM [2]. For a high light output, the addition of 5–10 wt. % DCM to  $Alq_3$  is chosen. Concentrations more than 10% leads to concentration quenching. To prevent the formation of aggregates and reduce intermolecular interaction based on the organic compound DCM, almost immediately after its discovery, work began on the synthesis of new compounds with a more dendritic (tree-like) structure of molecules [2].

We report the results of photoluminescence studies of (E)-2-(2-(4-(dimethylamino)styryl)-6-((3-hydroxyphenoxy)methyl)-4H-pyran-4-ylidene)malononitrile (DCM-18, chemical formula –  $C_{25}H_{21}N_3O_3$ ) thin film and the results of manufacturing OLED device based on this compound. We could not find any literature data on such studies.

The DCM-18, like DCM dye, has very broad absorption in between 275 and 600 nm, with absorption bands where the longer-wavelength band is found to be more intense than the shorter-wavelength band. The photoluminescence spectrum of the DCM-18 thin film, measured at room temperature, is exhibit three overlapping bands with the maxima at 570 nm, 635 nm and 665 nm in the visible region. About the peak around 660 nm for pure DCM also reported in the literature [3]. The emission intensities of the electroluminescence spectra of the our heterostructure with the configuration ITO/ $Alq_3$ :DCM-18 (10 wt. %)/ $Alq_3$ /Al increased with the increase in applied voltage. The wide band in the range from approximately 540 nm to 800 nm had a clear shoulder on the high-energy side. According to literature, normally,  $Alq_3$  emits green light at ~ 530 nm [4]. The electroluminescent emission of the ITO/ $Alq_3$ :DCM-18 (10 wt. %)/ $Alq_3$ /Al heterostructure (for current density 0.27 mA/cm<sup>2</sup>) had a CIE (x, y) color coordinates of (0.56, 0.32). That is, extra warm white light is emitted with an equivalent temperature  $T = 2112$  K. The obtained results will be useful in the optimization and design of highly efficient OLEDs.

This work was supported by National Research Foundation of Ukraine, project 2020.02/0217 "Light-generating low-dimensional structures with polarized luminescence based on organic and inorganic materials".

- [1] M. Sarma, L.-M. Chen, Y.-S. Chen, K.-T. Wong, *Mater. Sci. Eng. R*, **150**, 100689 (2022).
- [2] Y.-S. Yao, J. Xiao, X.-S. Wang, Z.-B. Deng, B.-W. Zhang, *App. Adv. Funct. Mater.*, **16**, 709 (2006).
- [3] A. Bruno, A. De Girolamo Del Mauro, G. Nenna, S.A. Haque, C. Minarini, *Polym. Compos.*, **34**, 1500 (2013).
- [4] A. Kaur, M.J. Cazeca, S.K. Sengupta, J. Kumar, S.K. Tripathy, *Synth. Met.*, **126**, 283 (2002).



## ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ БІПРАМІДАЛЬНИХ МЕТАЛЕВИХ НАНОЧАСТИНОК

**Володимир Ніколаєнко<sup>1</sup>, Андрій Коротун<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Національний університет «Запорізька політехніка», вул. Жуковського,  
64,

69063 Запоріжжя, Україна [andko@zp.edu.ua](mailto:andko@zp.edu.ua)

<sup>2</sup>Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,  
бульв. Академіка Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна

Останнім часом спостерігається підвищений інтерес до оптичних властивостей біпірамідальних металевих наночастинок, насамперед пов'язаний із їх потенціальним застосуванням в імуноаналізі [1].

Відомо, що металеві наноструктури характеризуються високою чутливістю положення піка їх локалізованого поверхневого плазмонного резонансу (ППР) до змін показника заломлення. Крім того, електричне поле в області, близькій до поверхні металевих наноструктур суттєво підсилюється порівняно з дальнім полем, коли вони освітлюються на частотах їх ППР. Для металевих наночастинок дослідження підсилення локальних полів, а також їх перерізів і частот ППР необхідні для оцінки можливостей потенціальних оптичних і біотехнологічних застосувань. Отже, ведеться пошук наноструктур, що демонструють як суттєве підсилення локального поля, так і великий поперечний переріз екстинкції, у порівнянні з металевими нанострижнями, а також мають налаштовувані частоти ППР, подібно до випадку стрижнів.

Розглядаються металеві біпіраміди, які мають п'ятикутну основу і дві гострі вершини. Подібно до стрижнів біпіраміди також володіють двома піками ППР, що відповідають коливанням електронів у поперечному і поздовжньому напрямках. Частоти поздовжнього ППР можна налаштовувати, змінюючи відношення висоти до лінійного розміру основи. Оскільки вершини металевих біпірамід гостріші за кінці стрижнів, то локальне підсилення електричного поля, пов'язане з біпірамідами, більше ніж пов'язане з нанострижнями, відповідно до ефекту «громовідводу».

У зв'язку з цим металеві біпіраміди є більш перспективними кандидатами, ніж металеві стрижні у застосуваннях, пов'язаних із двофотонною люмінесцентною візуалізацією та поверхнево-підсиленою раманівською спектроскопією (SERS).

[1] Y. Zhang, J. Jiao, Y. Wei, D. Wang, C. Yang, Z. Xu, *Analyt. Chem.*, **92** (22), 15244 (2020).



## ВЛАСТИВОСТІ РЕЗОНАНСНИХ НАНОСТРУКТУР ДЛЯ СТВОРЕННЯ ЯСКРАВИХ КОЛЬОРІВ

**Костянтин Оліфір<sup>1</sup>, Андрій Коротун<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Національний університет «Запорізька політехніка», вул. Жуковського,  
64,

69063 Запоріжжя, Україна [andko@zp.edu.ua](mailto:andko@zp.edu.ua)

<sup>2</sup>Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,  
бульв. Академіка Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна

Матеріали, що створюють яскраві кольори завдяки особливостям своєї мікроструктури використовуються людством із давніх часів. Дослідження, проведені в останні десятиліття, показали, що наночастинки металів завдяки їх сильному світлорозсіянню та можливостям спектрального налаштування є перспективними платформами для одержання структурованих кольорів, представлення кольорів із роздільною здатністю, обмеженою лише дифракцією. Ці оптичні резонансні наноструктури можна налаштовувати таким чином, щоб вони демонстрували інтенсивні кольори при освітленні білим світлом.

До вищезгаданих оптичних резонансів перш за все відносяться локалізовані поверхневі плазмонні резонанси, пов'язані зі збудженням колективних коливань вільних електронів у наночастинці при її опроміненні світлом із певною довжиною хвилі. На відміну від об'ємних плазмонів, поверхневі плаزمони являють собою електромагнітні хвилі, локалізовані поблизу межі поділу «метал – діелектрик». Тому такі еванесцентні хвилі є надзвичайно чутливими до геометрії та розміру наночастинок.

На сьогодні запропоновано та реалізовано декілька типів наноструктурованих фоточутливих матеріалів для створення яскравих і насичених кольорів. Одним із таких матеріалів є острівцеві металеві плівки, в яких острівці мають форму напівсферичних наночастинок. Яскравість і насиченість кольорів у таких матеріалах визначається спектральною шириною поверхневого плазмонного резонансу окремого розсіювача – металеві на півсфери у діелектричному оточенні. Тому визначення оптимальних розмірів і матеріалу розсіювача для створення наноструктур, що дадуть насичені яскраві кольори при освітленні білим світлом є актуальною задачею.

Спектральна ширина поверхневого плазмонного резонансу (ефективна швидкість релаксації) визначається адитивним внеском усіх механізмів релаксації: об'ємного і поверхневого розсіювання та радіаційного загасання

$$\gamma_{\text{eff}}^{1(\omega)}(R, \omega) = \gamma_{\text{bulk}} + \gamma_{\text{surf}}^{1(\omega)}(R, \omega) + \gamma_{\text{rad}}^{1(\omega)}(R, \omega). \quad (1)$$

де  $\gamma_{\text{bulk}} = \text{const}$  – швидкість об'ємної релаксації;  $\gamma_{\text{surf}}^{1(\omega)}$  і  $\gamma_{\text{rad}}^{1(\omega)}$  – швидкості поверхневої релаксації і радіаційного загасання, відповідно;  $\omega$  – частота падаючого світла;  $R$  – радіус напівсферичної частинки.

Одержано розмірно-частотні залежності спектральної ширини (ефективної швидкості релаксації) для півсфер різних металів на діелектричній підкладці, аналіз яких є важливим, оскільки при мінімальній спектральній ширині резонансу яскравість і насиченість кольору відбитого світла буде максимальною.





# ВПЛИВ РОЗМІРНИХ ЕФЕКТІВ НА ЕЛЕКТРИЧНЕ І МАГНІТНЕ ДИПОЛЬНЕ ПОГЛИНАННЯ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ АНСАМБЛЕМ СФЕРИЧНИХ МЕТАЛЕВИХ НАНОЧАСТИНОК

**Марина Перепелиця<sup>1</sup>, Андрій Коротун<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Національний університет «Запорізька політехніка», вул. Жуковського,  
64,

69063 Запоріжжя, Україна [andko@zp.edu.ua](mailto:andko@zp.edu.ua)

<sup>2</sup>Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,  
бульв. Академіка Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна

Взаємодія електромагнітного випромінювання з металевими наночастинками викликає інтерес як з експериментальної, так і теоретичної точок зору. Якщо розміри частинок малі у порівнянні з довжиною хвилі та з глибиною електромагнітного скіншару, то домінуючий внесок у поглинання викликаний електричним і магнітним дипольними членами. В обох випадках поглинання зумовлене джоулевым або омичним нагрівом, викликаним електричними струмами, які протікають крізь частинку.

Коефіцієнт поглинання електромагнітного випромінювання ансамблем металевих наночастинок, розподілених у діелектричній матриці з проникністю  $\epsilon_m$ , визначається виразом

$$\eta(\omega) = \frac{\beta\omega^2}{c} \epsilon_m \left[ \frac{9\epsilon_0}{\sigma_{dc}} + \frac{\sigma_{dc}R^2}{10\epsilon_0c^2} \right], \quad (1)$$

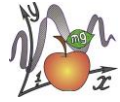
де  $\beta$  – об'ємна частка металевої фракції;  $R$  – радіус частинки;  $\sigma_{dc} = \epsilon_0\omega_p^2/\gamma_{\text{eff}}$  – статична електропровідність;  $\omega_p$  – плазмова частота, а  $\gamma_{\text{eff}}$  – ефективна швидкість релаксації, що визначається як

$$\gamma_{\text{eff}} = \gamma_{\text{bulk}} + \mathcal{S}(\omega, R) \frac{v_F}{R}. \quad (3)$$

Тут  $\gamma_{\text{bulk}}$  – швидкість релаксації у 3D-металі;  $v_F$  – швидкість Фермі електронів;  $\mathcal{S}(\omega, R)$  – ефективний параметр, що описує ступінь втрати когерентності при розсіянні електронів на поверхні.

Встановлено, що на частотах нижче плазмової електричне поле екранується всередині частинки, але магнітне поле може проникати крізь всю частинку. Результати розрахунків свідчать про те, що на оптичне поглинання впливає як електрична складова, так і магнітна. При цьому яка з цих двох компонентів домінуватиме в конкретній ситуації залежить як від частоти падаючого випромінювання, так і від розміру і форми включень.





## ВПЛИВ ХІРАЛЬНОСТІ НА ПОВЕРХНЕВІ ПЛАЗМОНИ У МЕТАЛ-ГРАФЕНОВОМУ НАНОСТРИЖНІ

**Олександр Суворов<sup>1</sup>, Ян Карандась<sup>1</sup>, Андрій Коротун<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Національний університет «Запорізька політехніка», вул. Жуковського, 64,

69063 Запоріжжя, Україна [andko@zp.edu.ua](mailto:andko@zp.edu.ua)

<sup>2</sup>Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, бульв. Академіка Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна

Плазмонні властивості наноструктур визначаються частотними залежностями поляризованості, яку в квазістатичному наближенні можна отримати з розв'язку граничної задачі електростатики. Оскільки розв'язки такої задачі існують лише для наночастинок деяких форм, зокрема сферичних та еліпсоїдальних, то властивості метал-графенових нанострижнів доцільно описувати за допомогою співвідношень для «еквівалентних» витягнутих еліпсоїдів обертання [1]:

$$\alpha_{\text{e}}^{\perp(\parallel)}(\omega) = V \frac{\epsilon_{\text{e}}^{\perp(\parallel)}(\omega) - \epsilon_{\text{m}}}{\epsilon_{\text{m}} + \mathcal{L}_{\perp(\parallel)}^{(2)} [\epsilon_{\text{e}}^{\perp(\parallel)}(\omega) - \epsilon_{\text{m}}]}, \quad (1)$$

де  $V$  – об'єм наночастинки;  $\epsilon_{\text{m}}$  – діелектрична проникність оточуючого середовища;  $\epsilon_{\text{e}}^{\perp(\parallel)}$  – діагональні компоненти тензора «еквівалентної» діелектричної проникності двошарового еліпсоїда

$$\epsilon_{\text{e}}^{\perp(\parallel)}(\omega) = \epsilon_{\text{G}}^{\perp(\parallel)} \left[ 1 + \frac{\beta_{\text{c}} (\epsilon_{\text{c}}^{\perp(\parallel)} - \epsilon_{\text{G}}^{\perp(\parallel)})}{\epsilon_{\text{G}}^{\perp(\parallel)} + (\epsilon_{\text{c}}^{\perp(\parallel)} - \epsilon_{\text{G}}^{\perp(\parallel)}) (\mathcal{L}_{\perp(\parallel)}^{(1)} - \beta_{\text{c}} \mathcal{L}_{\perp(\parallel)}^{(2)})} \right]. \quad (12)$$

Тут  $\beta_{\text{c}}$  – об'ємний вміст металу;  $\mathcal{L}_{\perp(\parallel)}^{(1)}$  і  $\mathcal{L}_{\perp(\parallel)}^{(2)}$  – поперечний (поздовжній) фактори деполізації осердя та всієї наночастинки;  $\epsilon_{\text{c}}^{\perp(\parallel)}$  і  $\epsilon_{\text{G}}^{\perp(\parallel)}$  – поперечна (поздовжня) компоненти тензора діелектричної проникності матеріалів осердя і графенової оболонки. Потрібно відзначити, що  $\epsilon_{\text{G}}^{\perp(\parallel)}$  співпадають із відповідними компонентами діелектричного тензора одношарових ахіральних вуглецевих нанотрубок.

Результати розрахунків залежностей  $\alpha_{\text{e}}^{\perp(\parallel)}(\omega)$  показали наявність суттєвого «червоного» зсуву поздовжнього ППР з оптичного в ІЧ діапазон у порівнянні з металевим циліндром. Це свідчить про доцільність практичного використання метал-графенових наночиліндрів у біології та медицині, оскільки поздовжній ППР потрапляє в те біологічне «вікно прозорості», що знаходиться в ІЧ області спектра.



## OPTICAL PROPERTIES OF NANOMATERIALS BASED ON THE $\text{Hg}_3\text{Te}_2\text{Cl}_2$ CRYSTALS

**O.O. Bokotey, O.V. Bokotey, P.P. Guranich, A.G. Slivka**

Faculty of Physics, Uzhhorod National University, Uzhhorod, Ukraine  
e-mail: bokotei.oleksandr@student.uzhnu.edu.ua

Remarkable progress was achieved in the study of the physical and chemical properties of crystals of the  $\text{Hg}_3\text{Te}_2\text{Cl}_2$  type. Our studies and literature survey show that these systems are very important for both application point of view and from physics and chemistry point of view. Their optical properties such as high refractive index, photoconductivity, electro-optical effect, optical activity, and optical nonlinearity make them promising nanomaterials for nonlinear application. Their structural, electronic, and optical properties depend sufficiently on synthesis conditions, structural defects, and morphological characteristics. From the structural point of view, the crystals under investigation are well ordered and observed that the basic structural unit in the title crystal is a  $[\text{XHg}_3]$  pyramid. The structure consists of two sets of octahedral spirals with different radii and twisting directions. These crystals possess excellent transparency in the mid-IR spectral range. Due to these features, the crystals of the corderoite family in nanoparticle form have a wide range of optical applications in nanophysics and medicine. Currently there is an extensive search for new materials for the next generation of semiconductor devices which would exploit electronic, and optical properties as well. Our work would be of great importance in these directions.

Nanomaterials based on  $\text{Hg}_3\text{X}_2\text{Y}_2$  crystals have tremendous potential in addressing the two major issues faced by our society: the search for new energy sources and improving healthcare. These crystals can be efficiently used for enhancement of the optical processes in biomolecules by nanostructured surfaces based on them. The optical rotation primary application of biological molecules involves the determination of secondary structures of proteins and nucleic acids. Obtained data suggest that the optical properties of the titled crystals should be taken into account in the studies concerning optical diagnostic methods in medicine. At the same time, the transparency of crystals in the corderoite family is in the wide region of the visible and IR range (ranging from 0.3 to 40  $\mu\text{m}$ ) creates new opportunities for materials design. They have great potential for a wide range of possible applications in optical devices: elements for dynamic holography, recording and information storage, modulators, deflectors, and other devices based on the phenomenon of the interaction of light beams.

- [1] O.V. Bokotey. Investigation of gyrotropic properties for  $\text{Hg}_3\text{X}_2\text{Cl}_2$  ( $\text{X} = \text{Se}, \text{Te}$ ) crystals. *J. Alloys Compd.*, V. 678, p.444–447 (2016).
- [2] O.V. Bokotey, T.V. Vu, D. D. Vo, O.O. Bokotey, A.G. Slivka. Electronic and optical properties of gyrotropic  $\alpha\text{-Hg}_3\text{S}_2\text{Cl}_2$ : insights from an ab initio study. *Indian J. Phys.*, V.95(1), p. 73-82 (2021).
- [3] O.V. Bokotey, Theoretical calculations of refractive properties for  $\text{Hg}_3\text{Te}_2\text{Cl}_2$  crystals. *Nanoscale Res. Lett.*, 11:251 (2016).
- [4] O.V. Bokotey, T.V. Vu, O.O. Bokotey. DFT study of structural, electronic and optical properties of  $\text{Hg}_3\text{S}_2\text{Br}_2$  crystal. *Comp. Cond. Matt.*, V.34, e00781 (2023).



## ДЕФЕКТОУТВОРЕННЯ У КВАНТОВИХ ТОЧКАХ CdS

**К.О. Вергелес, В.А. Сминтина, В.М. Скобеєва**

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,

вул.Дворянська,2, Одеса 65082, Україна

E-mail: klara2010@meta.ua

Колоїдні квантові точки (КТ) є перспективними матеріалами для багатьох галузей науки і техніки. Вони представляють особливий інтерес для використання в медицині при створенні біометричних маркерів і сенсорів.

Передумовою практичного застосування КТ CdS є розробка технології їх отримання з контрольованими властивостями. Одним із найпростіших і найбільш технологічних методів синтезу КТ є колоїдно-хімічний метод. На колоїдно-хімічний синтез КТ CdS впливає велика кількість чинників, пов'язаних з умовами проведення синтезу (тривалість, швидкість введення компонентів реакції, температура синтезу). Формування центрів світіння в КТ CdS залежить від багатьох технологічних факторів, серед яких концентрація іонів кадмію та сірки і їх співвідношення. Результати впливу цих факторів представлені в даному дослідженні.

Досліджувані нанокристали сульфід кадмію були отримані хімічним методом з розчинів солей кадмію (нітрат кадмію) і сірки (сульфід сірки) в колоїдному розчині желатини.[1]

В роботі показано, що контур смуги люмінесценції залежить від співвідношення вихідних компонентів реакції синтезу, що проявляється у стехіометричному складі власних дефектів поверхні КТ. На підставі розрахунку молярної концентрації компонентів гідролізу солі кадмію  $Cd(NO_3)_2$ , зроблено висновок про тип власних дефектів, які обумовлюють спостережуваний спектр фотолюмінесценції КТ CdS. Та встановлено вплив концентрацій кадмію і сірки на розмір та дисперсію розміру КТ CdS.

Люмінесценція КТ CdS, отриманих методом колоїдної хімії, зумовлена власними дефектами, що пов'язано з впливом стехіометричного складу кадмію і сірки. Стехіометричний вклад залежить від концентрацій вихідних компонентів реакції синтезу на випромінювальні властивості КТ CdS. Встановлено, що збільшення концентрації іонів сірки сприяє збільшенню розміру КТ CdS і зменшенню розкиду за розміром.

За результатами розкладання спектрів люмінесценції, з урахування результатів впливу стехіометричного співвідношення іонів кадмію та сірки в розчині, зроблено висновок щодо природи смуг, що спостерігаються: 1) в КТ сульфід кадмію з надлишком кадмію реєструється короткохвильова смуга світіння ( $\lambda = 462 \div 493$  нм) природу якої можна зв'язати з кадмієм міжвузельним; 2) в КТ з надлишком сірки - довгохвильова смуга, природа якої пов'язана з вакансією сірки ( $\lambda = 660 \div 711$  нм); 3) в спектрах фотолюмінесценції КТ, в яких концентрації іонів кадмію і сірки майже однакові, реєструється смуга світіння в області ( $\lambda = 555 \div 598$  нм), яка зумовлена асоціативним дефектом, пов'язаним з вакансіями кадмію і сірки.

Результати експериментів свідчать про те, що технологічний процес має суттєвий вплив на формування смуг випромінювання КТ сульфід кадмію. Отримані результати можуть бути використані у якості рекомендації для синтезу КТ CdS із заданим спектром світіння.

[1] V.A. Smyntyna, V.M. Skobeeva, K.A. Verheles, N.V. Malushin. Influence of technology on the formation of luminescence centers in QDs CdS //Journal of nano- and electronic physics. Sumy State University, 2019, Vol. 11 No 5, 05031(4pp) (2019) DOI: 10.21272/jnep.11(5).05031



## OPTICAL PROPERTIES SILVER'S NANOFILMS

**Anastasiia Huk**

**Lviv National University named Ivan Franko,  
Universytetska-street 1, Lviv, Ukraine, 79000,**

**[anastasiia.huk@lnu.edu.ua](mailto:anastasiia.huk@lnu.edu.ua)**

Modern micro- and nanosystem technics investigates nanomaterials which constitute complex two or more nanosized homogeneous phases and looking for nanosized systems which will be capable reliably to perform necessary functions in dimensional area  $d \sim 10\text{nm}$ . One of the examples that kind materials is the nanosized metals condensates which are formed on the semiconductor weakly conductive sublayers. Thanks to impact dimensional effect such systems changes physical properties in wide dimensional diapason (2-20nm). Especially their properties are interesting in the neighborhood percolation transition because of simultaneous formation dispersed and continuous phase metals condensate.

One of the options modifications structure of the silver's film is way previous causing superficially active substances, in particular germanium, on the surface lining.

Silver's films obtained under high vacuum in evacuated glass instruments by means of condensation of metal on glass substrate at room temperature. Sublayer surface active substances (antimony) were applied directly before applying silver. Resistance to germanium film thickness to 1 nm was larger than  $10^9$  ohms. Thickness of the layers of silver and germanium superintended by the shift of the resonance frequency of piezoelectric quartz detector. The sensitivity of this method is 100 Hz / nm. Dimensional dependence of kinetic coefficients determined assisted combined digital device ІІ301-1. Transmission and reflection spectra of silver's films gauged used a broadband spectrophotometer SHIMADZU UV-3600.

Investigated the silver film thickness of 10 nm deposited on sublayers germanium to 2 nm. From the dimensional dependence of the resistance film of silver in the percolation model, it showed that the onset of ohmic conductivity of the metal film thickness corresponds to 10 nm, whereas when germanium thickness more than 0,5 nm, the physical properties of silver films is ohmic. From the optical spectra, it was found that the silver's film with germanium lining higher equal 0,5 nm can be used as a passive optical filter with transmittance of 30% in the wavelength range from 400 nm to 2500 nm. Such metallic systems are of considerable practical value as stable optically glassy and electrically conductive coatings for the needs of modern micro- and nanoelectronics on the path of microminiaturization and can operate in dimensional regions  $D < 10$  nm.

1. J. Kyoung. Direct in site observation of the percolation transition in  $\text{VO}_2$  thin films by peak-shift spectroscopy. *Optical Materials Express*. (2022). Vol. 12, Issue 3. pp. 1065-1073.
2. P. Smilauer. *Contemporary Physics*. (1991). Vol. 32, № 2. P. 89-102.
3. Bihun R. I., Buchkovs'ka M.D., Koman B. P., Leonov D. S. Germanium Wetting Layers Dimensional Effect in Structural and Optical Properties of Silver Films. *Nanosystems, nanomaterials and nanotechnologies*. (2022). Vol. 20, № 4. P. 929-939.



## ДОСЛІДЖЕННЯ МОРФОЛОГІЇ ПОВЕРХНІ ТОНКИХ ПЛІВОК $(Y_{0.06}Ga_{0.94})_2O_3$ З ДОМІШКОЮ Cr

Іванна Медвідь, Марія Процак, Катерина Біляк, Богдан Бордун,  
Данило Максимчук, Аліна Мацаєнко

Львівський національний університет імені Івана Франка,  
факультет електроніки та комп'ютерних технологій,  
м. Львів, вул. Драгоманова, 50, email: [ivanna.medvid@lnu.edu.ua](mailto:ivanna.medvid@lnu.edu.ua)

Тонкі плівки  $(Y_{0.06}Ga_{0.94})_2O_3$  володіють низкою цікавих властивостей, наприклад, вони характеризуються високою твердістю, стійкістю до корозії, що робить їх корисним матеріалом для виробництва твердотільних електронних пристроїв, таких як транзистори. Крім цього, дані плівки можуть використовуватися для виготовлення електронних дисплеїв та оптичних систем. Властивості тонких плівок можуть змінюватися залежно від методу отримання, а також, подальших технологічних прийомів, таких як введення домішок та відпал. Чисті та активовані тонкі плівки  $(Y_{0.06}Ga_{0.94})_2O_3$  товщинами 0,2 – 1 мкм отримувалися методом ВЧ іонно-плазмового розпилення на підкладках з плавленого кварцу  $\nu$ -SiO<sub>2</sub>. Після осадження тонких плівок здійснювалася їх термообробка в атмосфері кисню або аргону при температурі 1000–1100 °С, а також в атмосфері водню при температурі 600 – 650 °С. Рентгенодифракційні дослідження тонких плівок  $(Y_{0.06}Ga_{0.94})_2O_3$  показали наявність полікристалічної структури, яка дещо відрізняється залежно від способу термообробки плівок. Аналіз дифрактограм показав, що структура даних плівок відповідає моноклінній кристалічній структурі  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [1]. Морфологія поверхні отриманих тонких плівок досліджувалася з використанням АСМ мікроскопа, зображення поверхні плівок реєструвалися у напівконтактному режимі. Дослідження морфології поверхні плівок  $(Y_{0.06}Ga_{0.94})_2O_3$ :Cr проводилося для невідпаленої та відпаленої плівки у атмосфері аргону. Дані аналізувалися з поверхні розміром 1000 × 1000 нм. Отримані результати показали, що невідпалена плівка характеризується середнім розміром зерна (діаметр зерна) приблизно 50 нм. Середня квадратична шорсткість поверхні такої плівки становить 0,5 нм. Аналіз морфології поверхні тонких плівок  $(Y_{0.06}Ga_{0.94})_2O_3$ :Cr, відпалених в аргоні показав, що середній розмір зерна становить 57 нм і середня квадратична шорсткість поверхні даних плівок становить 1,8 нм. Як бачимо з отриманих результатів відпал плівок приводить до зміни морфології поверхні даних зразків.

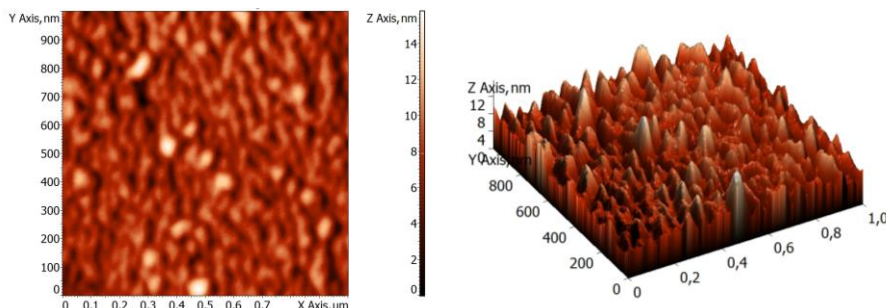


Рис. 1. Морфологія поверхні плівок  $(Y_{0.06}Ga_{0.94})_2O_3$ :Cr, відпалених в атмосфері аргону

[1] О.М. Бордун, І.Й. Кухарський, І.І. Медвідь, Ж.Я. Цаповська, Фізика і хімія твердого тіла., **18** (1), 89 – 93 (2017).





## ДОСЛІДЖЕННЯ МОРФОЛОГІЇ ПОВЕРХНІ ТОНКИХ ПЛІВОК $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$

Іванна Медвідь, Володимир Бігдай, Марія Процак, Катерина Біляк,  
Богдан Бордун, Ірина Кофлюк, Віктор Сорокін

Львівський національний університет імені Івана Франка,  
факультет електроніки та комп'ютерних технологій,

м. Львів, вул. Драгоманова, 50, email: [ivanna.medvid@lnu.edu.ua](mailto:ivanna.medvid@lnu.edu.ua)

Галат цинку ( $\text{ZnGa}_2\text{O}_4$ ) викликає інтерес у дослідників, оскільки він є перспективним матеріалом для різноманітних застосувань, зокрема, як прозорий провідний оксид, фотокаталізатор, газовий сенсор. Властивості тонких плівок галату цинку вивчалися для можливого використання у сонячних елементах, оскільки вони є широкозонними напівпровідниками та мають добру прозорість у видимому діапазоні. Електричні, оптичні властивості та морфологія поверхні тонких плівок  $\text{ZnGa}_2\text{O}_4$  залежать від методів та умов отримання, введення домішок, а також, від інших способів обробки плівок, наприклад, таких як відпал. Тонкі плівки  $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$  отримувалися методом ВЧ іонно-плазмового розпилення на підкладках з плавненого кварцу  $\nu\text{-SiO}_2$ . Після осадження тонких плівок здійснювалася їх термообробка в атмосфері кисню або аргону при температурі 1000–1100 °С, а також в атмосфері водню при температурі 600 – 650 °С. Рентгенодифракційні дослідження тонких плівок показали наявність полікристалічної структури. Морфологія поверхні тонких плівок  $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$  досліджувалася з використанням АСМ мікроскопа. Зображення поверхні плівок реєструвалися у напівконтактному режимі. Дослідження морфології поверхні плівок  $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$  проводилося для невідпаленої та відпаленої плівки у атмосфері аргону. Дані аналізувалися з поверхні розміром  $5 \times 5$  мкм.

Таблиця 1

Плівка	Атмосфера відпалу	Середня квадратична шорсткість поверхні, нм	Середній діаметр зерен, нм
$\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$	без термообробки	9,6	211
$\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$	аргон	14,6	222

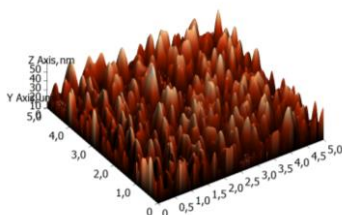
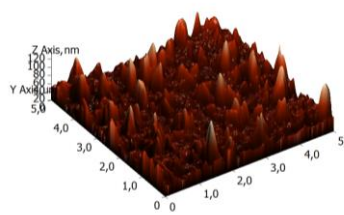
*a**б*

Рис. 1. Морфологія поверхні плівок  $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$ : *a* – без термообробки, *б* – відпалених в атмосфері аргону

Отримані результати показують, що наявність відпалу приводить до зміни морфології поверхні тонких плівок  $\text{ZnGa}_2\text{O}_4:\text{Cr}$  і збільшення розмірів нанокристалічних зерен, які формують дані плівки.



## INFLUENCE OF THE THERMAL ACTIVATION MECHANISM ON THE THERMAL CONDUCTIVITY OF ALICYCLIC HYDROCARBONS.

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

B. Verkin ILTPE of NASU, Kharkiv, Ukraine

e-mail: [zvonyarova@ilt.kharkov.ua](mailto:zvonyarova@ilt.kharkov.ua)

An increase in thermal conductivity with temperature was observed in all orientationally disordered "plastic" phases of molecular crystals. For a long time, this behavior was explained by the weakening of background scattering on rotational excitations of molecules as the rotation is decelerated. Over time, some doubts appeared in the proposed mechanism.

The objects of this investigation were such alicyclic hydrocarbons as: benzene, cyclohexane, cyclohexene, cyclopentane furan, thiophene, and tetrahydrofuran. Atoms of such conjunctions forming a ring. They can be subdivided into homocyclic, containing in a cycle only one chemical element, and heterocyclic, containing in a cycle atom of different elements.

Recently, was published in [1] general microscopic theory of heat conduction was presented:

$$\kappa(T) = \kappa_{ph} + \kappa_{dif} = A/T + B \quad (1)$$

where  $\kappa_{ph}$  – is the heat transfer by phonons,  $\kappa_{dif}$  – is diffuse contribution which does not depend on temperature.

At high temperatures, the behavior of the isobaric and isochoric thermal conductivities of molecular crystals are different. Such behavior is explained by the appearance of a thermal activation mechanism. This contribution is associated with thermal activation of some intramolecular modes. In works [2-3], this contribution was described using the Arrhenius equation

$$\kappa_{TA}(T) = \kappa_0 \exp(-E/T) \quad (2)$$

This expression contains two parameters.  $\kappa_0$  is the pre-exponential factor and the activation energy  $E$ . These parameters are typical for the thermal activation process. This study is a continuation of the study of the thermal activation mechanism. This contribution leads to an increase in thermal conductivity with temperature in the orientationally disordered phases of molecular crystals [4].

[1] M. Simoncelli, N. Marzari and F. Mauri, Nature Physics **15**, 809 (2019).

[2] V.A. Konstantinov A. Belmiloudi (Ed.) InTech Open Access Publisher 157 (2011).

[3] YuV. Horbatenko, O.O. Romantsova, O.A. Korolyuk et al. J. Phys. Chem. Solid. **127**, 151 (2019).

[4] M.A. Strzhemechny, A.I. Krivchikov, A. Jezowski, et al. Chem. Phys. Lett. **647**, 55 (2016).

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





## FORMATION OF NANOSTRUCTURES ON SILICON SEMICONDUCTOR SURFACES OF (110) AND (111) ORIENTATION

**Mykola Stretovych**

NTUU KPI, Kyiv, Ukraine, melon2451@gmail.com

Semiconductors are widely used in electronics and other technologies due to their specific electrical properties. Germanium and Silicon are some of the most common semiconductors. Both of them have the diamond cubic crystal structure and slightly differ in the lattice constant.

While semiconductors have been studied to a great extent, the science of nanotechnology is still developing rapidly and finding more and more applications across other fields. Nanostructures, which include nano- particles, wires, surfaces and other complex geometries, can already be used in biomedical engineering, optics, electronics, and plasmonics, specifically in the forms of sensors, polarizers, absorbents, conductors etc [1,2,3].

Surface etching on the micro- and nanoscale shows a strong anisotropy, which can be explained by different surface energies depending on the face orientation or that the atoms of different faces vary in the number of bonds. Still, the process of surface etching and stimulation has to be studied more extensively to obtain more consistent predictions for practical applications [4].

In this work kinetic Monte Carlo method for computer simulation of the physical process was used. It's a statistical rather than a tracing method, which significantly lowers the requirements for computational resources and, as a result, the time. This method allows to follow the evolution of the surface structure not just for the initial stage but also until quite significant changes in the order of the geometry have been established [5].

The Monte Carlo method uses the statistical probability for an atom to diffuse along the surface or detach and enter the "gas" above it, based on the activation energy, local bindings of the atoms, as well as the temperature of the system. Atoms from the gas also have a chance to attach to any point of the surface.

Under stimulated conditions, the surfaces of both orientations are shown to go through a stage of local instabilities until larger structures start to form that serve as formation centers. These formations seem to have a specific order: for (111) orientation - triangular pits and clusters, for (110) – triangular trenches and hillocks.

We think that the major role in the forming of the structures over the initial surface plays the process of sublimation and deposition. Due to the different curvature of larger instabilities the vaporization is different from different sites: atoms on top of the hillocks have less bonds with the surface, than those in the pits. At the same time, free atoms are more likely to be deposited on the hillocks, since the possible paths to lower surfaces are greatly blocked.

- [1] S. Jafari et al. *International Journal of Nanomedicine*. 2020. Volume 15. P. 3447–3470.
- [2] D. Nunes et al. *Semiconductor Science and Technology*. 2019. Vol. 34, no. 4. P. 043001.
- [3] A. Barranco et al. *Progress in Materials Science*. 2016. Vol. 76. P. 59–153.
- [4] M. Elwenspoek et al. *IEEE Micro Electro Mechanical Systems An Investigation of Micro Structures, Sensors, Actuators, Machines and Robotic Systems*, Oiso, Japan.
- [5] Battaile C. C. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2008. Vol. 197, no. 41-42. P. 3386–3398.



## SYNTHESIS AND CHARGE TRANSPORT CHARACTERISATION OF WTe<sub>2</sub> THIN FILMS

**Natalia Amirulloieva<sup>1,2</sup>, Gatis Mozolevskis<sup>3</sup>, Gunta Kunakova<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>University of Latvia, Institute of Chemical Physics, Riga, Latvia

<sup>2</sup>Prydniprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture, Dnipro, Ukraine

<sup>3</sup>Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Riga, Latvia

[amirulloeva.nataly@pdaba.edu.ua](mailto:amirulloeva.nataly@pdaba.edu.ua)

Transition metal dichalcogenides (TMDs), particularly tungsten ditelluride (WTe<sub>2</sub>), has been extensively studied over the past few years, due to recently discovered exotic electron transport properties, such as quantum spin Hall effect and Type-II Weyl semimetal phase, promising for future applications in energy-efficient electronic and spintronic devices [1].

Majority of the established growth protocols for obtaining TMDs have been developed for tungsten and molybdenum sulphides and selenides while growth of tungsten ditelluride is more challenging, due to the fact, that the difference in electronegativity between Te and W is small (about 0.4 eV) [2] and the bond between Te and W is weak.

Single-crystal monolayers with transverse dimensions on the order of 10–100 μm WTe<sub>2</sub> can be fabricated *via* a single-stage chemical vapor deposition (CVD), using Te, WO<sub>3</sub> and WCl<sub>6</sub> precursors [3–5]. However, using this approach it is challenging to control the film thickness. Alternative route is to convert pre-deposited WO<sub>x</sub> thin-film precursor to WTe<sub>2</sub>, but so far reported thin-films are of poor crystallinity and uniformity.

In this work fabrication of crystalline WTe<sub>2</sub> thin films from WO<sub>x</sub> thin-film precursor has been investigated. WO<sub>x</sub> thin-film precursor was obtained using reactive DC magnetron sputtering, on Si/SiO<sub>2</sub> substrates. The WO<sub>x</sub>/SiO<sub>2</sub>/Si samples were further heated together with Te in 475 – 665°C temperatures and in Ar/H<sub>2</sub> flow of ratio 2:1. The morphology of WTe<sub>2</sub> was investigated using scanning electron microscopy (SEM). Obtained tungsten telluride films are uniform with grain size of 40-100 nm (Fig.1). The Te : W ratio was determined by the SEM-EDX. With an increase in temperature, a slight decrease in stoichiometry is observed. This can be explained by the fact that, at a lower reaction temperature, an excess of Te is introduced into the film without reacting with tungsten.

Charge transport measurements were done in the PPMS-Dynacool 9T, and charge transport parameters – mobility and carrier density are determined.

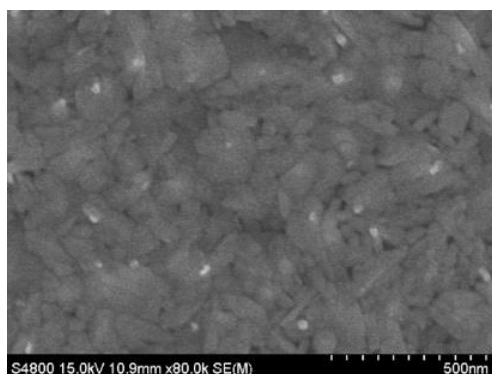


Figure 1. SEM image of WTe<sub>2</sub> thin film on SiO<sub>2</sub>/Si

1. Gong CH, and all. Adv Sci. 2017;4(12):1700231.
2. Zhou Y, and all. Adv Funct Mater, 2017, 27.
3. Chen K, and all. Adv Mater. 2017;29(38):1700704.
4. Naylor CH, and all. 2D Materials. 2017; 4(2):021008.
5. Zhou J, and all. Adv Mater. 2017;29(3):1603471.

Acknowledgement. This research is funded by the Latvian Council of Science, project No. lzp-2021/1-0302.



## ЗОННА СТРУКТУРА КРИСТАЛІВ $\text{LiH}_3(\text{SeO}_3)_2$

**Михайло Онисько, Олег Бовгира, Марія Коваленко**

Фізичний факультет, Львівський національний факультет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 8 79005 Львів, Україна

[mykhailo.onysko@lnu.edu.ua](mailto:mykhailo.onysko@lnu.edu.ua)

Останні десятиліття супроводжуються значними змінами і прогресом у галузі відновлюваної енергетики. Зокрема, сонячна енергетика займає все більш вагомую позицію у сфері використання джерел зеленої енергії. Однак досягнення більшої ефективності сонячних панелей, які базуються на стандартних напівпровідникових р-п-переходах, обмежено властивостями зонної структури самих напівпровідників. Це вимагає пошуку нових, ефективних та стабільних матеріалів для перетворення сонячного випромінювання на електричну енергію. У цьому контексті, одним із об'єктів дослідження є сегнетоелектричні кристали із доменною структурою, яка забезпечує додатковий ступінь свободи в розділенні та транспортуванні зарядів, забезпечуючи ефективне виділення носіїв заряду та покращений фотоелектричний відгук. Крім того, можливість зміни сегнетоелектричних властивостей через композиційні модифікації та зовнішні впливи надає можливості для оптимізації фотоелектричної ефективності та стабільності таких матеріалів. Дослідження сегнетоелектричного кристала  $\text{LiH}_3(\text{SeO}_3)_2$ , в якому підтверджено існування фотовольтаїчного ефекту, є актуальною задачею.

У даній роботі, на основі першопринципних розрахунків у межах теорії функціоналу електронної густини досліджено зонно-енергетичні діаграми кристала  $\text{LiH}_3(\text{SeO}_3)_2$ . Оптимізацію геометрії структури та зонно-енергетичні розрахунки проведено в програмному пакеті CASTEP, для іонних потенціалів використано ультратрам'які псевдо-потенціали Вандербільта; для опису обмінно-кореляційного потенціалу використано узагальнену градієнтну апроксимацію (GGA PBE, PBEsol, BLYP) та гібридні функціонали (B3LYP, HSE).

$\text{LiH}_3(\text{SeO}_3)_2$  – моноклінний кристал із параметрами ґратки  $a = 6,2534 \text{ \AA}$ ,  $b = 7,883 \text{ \AA}$ ,  $c = 5,4335 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 105,18^\circ$  за кімнатної температури. Елементарна комірка кристалу містить дві формульні одиниці, йони  $\text{Li}^+$  зв'язані октаедричною геометрією з шістьма йонами  $\text{O}^{2-}$  (довжина зв'язків  $\text{Li}-\text{O}$  змінюється діапазоні від 2,15–2,28  $\text{ \AA}$ ). Також, структурні дослідження показали існування сильних водневих зв'язків  $\text{O}-\text{H}\dots\text{O}$ , що лежать в кристалографічній площині, до якої перпендикулярний полярний напрям [001].

Отримано ширину забороненої зони 6,0 еВ (B3LYP). Властивості електронного спектра описано в розрізі розгляду парціальних розподілів густини електронних станів. Енергетичні стани, які формують вершину валентного комплексу формуються р-орбіталями іонів кисню гібридизованими із s-р орбіталями Se, а стани дна зони провідності пов'язані із р-орбіталями Se.

Робота виконана в рамках проекту 2020.02/0130 «Багатофункціональні органічно-неорганічні магнітоелектричні, фотовольтаїчні і сцинтиляційні матеріали» (реєстр. № 0120U104913) за грантової підтримки Національного фонду досліджень України.



## ДОСЛІДЖЕННЯ СТРУКТУРИ ШАРУВАТИХ ПЛІВОК $\text{Si}\backslash\text{Sn}\backslash\text{Si}$ ВИГОТОВЛЕНИХ МЕТОДОМ ТЕРМІЧНО- ВАКУУМНОГО ОСАДЖЕННЯ

**І. В. Ольховик<sup>1</sup>, В. Б. Неймаш<sup>2</sup>, П. Є. Шепелявий<sup>3</sup>, А. С. Ніколенко<sup>3</sup>,  
В. В. Стрельчук<sup>3</sup>, В. І. Чегель<sup>3</sup>, С. О. Воронов<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського", Україна, 03056, м.Київ, Берестейський проспект (Перемоги), 37. E-mail: [illia.olkhovyk@gmail.com](mailto:illia.olkhovyk@gmail.com)

<sup>2</sup> Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, пр. Науки, 41, Київ 03028, Україна

<sup>3</sup> Інститут Фізики НАН України, пр. Науки, 46, Київ 03028, Україна

Об'єктами досліджень служать плівкові 3-шарові структури «аморфний кремній - металеве олово – аморфний кремній» на підкладках із монокристалічного кремнію марки КЭФ-4,5. Вони виготовлені шляхом послідовного осадження парів кремнію (99,999%), олова (99,92%) та знову кремнію термічно випарених у вакуумі з танталових випарників, розжарених електричним струмом. Осадження відбувалося на поліровані до 6 класу досконалості підкладки з монокристалічного кремнію електронного рівня чистоти товщиною 300 мкм при температурі підкладок  $\sim 150$  °С в послідовності: шар аморфного кремнію на монокристалічну підкладку, на нього шар олова, потім другий шар аморфного кремнію поверх шару олова.

Шаруваті плівки  $\text{Si}\backslash\text{Sn}\backslash\text{Si}$ , виготовлені методом термічно-вакуумного осадження, мають поверхню, рельєф якої структурований у вигляді квазі-сферичних утворень з латеральним розміром від 20 нм до 2-3 мкм. В залежності від товщини шару олова їх форма і розмір змінюється від випуклих еліпсоїдів та багатокутників до грона-подібних дендритів фрактального типу. Такі дендрити можуть створювати поруватий (розміри пор лежать в діапазоні від 1 до 100 нм) шар аморфного кремнію.

Первопричиною структуризації поверхні плівок  $\text{Si}\backslash\text{Sn}\backslash\text{Si}$  є розплавлення і розпад на мікро-краплі шару олова під час осадження олова і кремнію. Утворення мікро-крапель Sn під дією сил поверхневого натягу в умовах слабкого змочування оловом кремнію зумовлює квазісферичний рельєф шару рідкого олова, на який відбувається подальше осадження атомів кремнію і формування зовнішньої поверхні.

Отримані результати можуть бути використані як для зменшення, так і для збільшення шорсткості поверхні плівок  $\text{Si}\backslash\text{Sn}\backslash\text{Si}$ , що є важливим в контексті розвитку існуючих технологій формування плівкового нанокремнію для приладобудування та для створення покриттів здатних ефективно розсіювати світло. Крім того, ці результати відкривають певні перспективи для розробки нових способів виготовлення поруватого кремнію методом термічно-вакуумного осадження.

Отримані в даній роботі результати можуть бути використані для вдосконалення існуючих технологій формування плівкового нанокремнію для сонячних елементів, а також для виготовлення ізоморфних кремнію світлорозсіювальних покриттів.



## ELECTRON TRANSPORT PROPERTIES OF NANOSITHED SILVER FILMS

Аpopii V., Koplak O.

Ukraine, Lviv, Ivan Franko Lviv national university, 50 Dragomanov st.

e-mail: victor.apopii@lnu.edu.ua

Dynamic electron properties of thin metal films provide information about transport phenomenon in metal films. Optical properties of nanosized silver films were studied a lot but fundamental analysis of thickness dependencies of effective optical parameters is lacking. We have developed methodology for assessing transport kinetic parameters on the basis of the thickness dependent optical constants of the films. Ultrathin silver films in the vicinity of percolation threshold have been studied. The critical thickness of the films, mean linear grain size and grain boundary scattering parameters of charge carriers have been determined from the size dependencies of the effective optical constants. The experimental data are in good agreement with those obtained by structural and electron transport investigations of the samples. Silver films have been obtained by the thermal evaporation on the glass substrate under high vacuum condition ( $P \sim 10^{-7}$  torr) at room temperature. Metal film mass thickness of is estimated by the shift of the resonance frequency of piezo-quartz vibrator. Measuring the resistance of the films was carried out electronically by the digital ohmmeter UT70-A. Transmittance and reflectance spectra were measured by broadband spectrophotometer Shimadzu UV-3600. Silver films conductivity size dependencies with thicknesses in range 6 to 20 nm in the wavelength range 180-2000 nm were investigated. Optical coefficients  $n$  and  $k$  have been calculated from the spectral data using Phillips equations [1]. Optical conductivity, effective charge carrier mass, effective relaxation time, skin depth values were calculated. The critical thickness at which metallic phase is formed was found to be 15 nm. It was determined within the framework of the percolation theory [2] (in the vicinity of the percolation threshold transmittance and reflection spectra do not depend on the frequency). This is confirmed by the dynamic conductivity data which are frequency independent for this thickness value of the film. Another proof is the dramatic change of the sign of the first derivative of the dielectric permittivity on frequency ( $d\epsilon_1/d\nu$ ) around the thicknesses of silver layer 14-16 nm. The effective mass of the charge carrier was around  $1,2 \pm 0,2 m_0$ , which allowed us to use the free electron model [3] in finding of dielectric constants. Mean grain sizes were estimated. They proved to be commensurable with film thicknesses. For example, for film thickness  $d = 15$  nm linear grain size is  $D = 22$  nm and for thickness  $d = 20$  nm,  $D = 25$  nm. The thickness of the percolation transition was evaluated in [4]. It was shown, that parameter has descending character up to the percolation region. The intergrain tunneling coefficient for thin silver films with metallic type conduction were calculated. It is value around  $t \sim 0,62-0,75$ . The data is in good agreement with those investigations by the direct electro transmission microscopy of the films in the framework of grain boundary scattering theories.

Basis on optical, electrical and structural studies of nanosized metal Ag films, we found kinetic charge transport parameters for the silver films with the thicknesses 8-25 nm around percolation threshold. It is shown, that the average linear grain sizes evaluated with different methods are the same and are commensurable with thickness of metal Ag film. Grain-boundary scattering parameters obtained from spectral characteristics are in good agreement with previously evaluated values on electrical resistivity studies of the films.

[1] Phillips R. T. J. Phys. D: Appl. Phys. 1983. Vol. 16. P. 489–497.

[2] Pavel Smilauer, Contemporary Physics, 1991, Vol. 32, no. 2, p. 89-102.

[3] Dressel M., Grüner G., Electrodynamics of Solids, Cambridge University Pres, Cambridge, 2002.

[4] Bihun R. I., Stasyuk Z. V., Syvorotka I. I., Gavrylukh V. M., Buchkovs'ka M. D., Koman B. P., and Leonov D. S. Metallophysics and Advanced Technologies. 2021. Vol. 43, №11. P. 1431-1441.





## ЕЛЕКТРОЄМНІСНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВУГЛЕЦЕВИХ МАТЕРІАЛІВ ОТРИМАНИХ ІЗ ВІДХОДІВ КАВОВОЇ ГУЩІ

**С.-В. Склепова, І. Гасюк, Н. Іванічок, Д. Борчук, Б. Рачій**

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,  
вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, 76018, Україна  
[sonja93sklepova@gmail.com](mailto:sonja93sklepova@gmail.com)

Нанопористий вуглецевий матеріал (НВМ) найчастіше використовують для виготовлення електродів електрохімічних конденсаторів (суперконденсаторів), оскільки він хімічно стійкий, порівняно дешевий в отриманні та комерційно доступний. НВМ володіє великою питомою поверхнею, що є важливим для даного застосування [1], однак лише електрохімічно доступна площа поверхні корисна для формування подвійного електричного шару (ПЕШ), що значною мірою впливає на ємнісні характеристики пристроїв накопичення і збереження енергії. У даній роботі представлено значення питомої площі поверхні та відповідну величину електроємності НВМ отриманих в результаті термохімічної активації гідроксидом калію відходів кавової гущі [2]. Серію зразків (S400÷S900) нумерували відповідно до температури термохімічної активації (табл.). Питома площа поверхні отриманих НВМ була визначена на основі ізотерми адсорбції азоту за допомогою автоматичного газового аналізатора Autosorb Nova 2200e багатоточковим методом БЕТ ( $S_{\text{БЕТ}}$ ). Електрохімічні дослідження НВМ проводилися на спектрометрі Autolab PGSTAT/FRA-2, використовуючи методи циклічної вольт-амперометрії та гальваностатичного циклювання. Дослідження проводились з використанням двохелектродної комірки. Електроди електрохімічних систем виготовлялись у формі ламельок із суміші, яка складалася з 75 % НВМ і 25 % струмопровідної добавки.

Питома площа поверхні та питома ємність термохімічно активованих НВМ

Зразок	S400	S500	S600	S700	S800	S900
$S_{\text{БЕТ}}, \text{ м}^2/\text{Г}$	31	172	374	446	703	1056
$C_{(1 \text{ мВ/с})}, \text{ Ф/Г}$	76	111	139	154	166	150
$C_{(10 \text{ мА})}, \text{ Ф/Г}$	76	117	143	157	167	153

Результати досліджень показали, що температура активації є важливим фактором, який впливає на морфологію та ємнісні характеристики НВМ (табл.). Слід зазначити, що питома площа поверхні НВМ зростає при збільшенні температури активації. Проте, максимальні значення електроємності демонструє зразок S800. Актуальною науковою проблемою є встановлення взаємозв'язку між параметрами пористої структури НВМ його електропровідністю та електроємністю суперконденсаторів сформованих на його основі.

[1]. E. Frackowiak. (2007) Carbon materials for supercapacitor application. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 9(15), 1774. doi:10.1039/b618139m.

[2]. S.-V.S. Sklepova, I.M. Gasyuk, N.Ya. Ivanichok, P.I. Kolkovskiy, V.O. Kotsyubynsky, B.I. Rachiy. (2022) The porous structure of activated carbon-based on waste coffee grounds. *Physics and Chemistry of Solid State*, 23(3), 484. doi:10.15330/pcss.23.3.484-490.



## ПОРИСТА СТРУКТУРА ВУГЛЕЦЕВИХ МАТЕРІАЛІВ АКТИВОВАНИХ ХЛОРИДОМ ЦИНКУ

**А. Солтис, С. Климкович, В. Повх, І. Паневник, А. Глубіцький,  
О. Винничук**

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,  
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76018, Україна

[andrii.soltys.22@pnu.edu.ua](mailto:andrii.soltys.22@pnu.edu.ua)

За даними Вікіпедії, в 2013 році близько 21 % світового енергоспоживання було забезпечене з відновлюваних джерел енергії, а заплановано, що до 2040 року до 40 % світової електроенергії буде вироблятися із відновлюваних джерел. Українські плани – збільшити відсоток із 4 % до 25 % до 2035 року. Таким чином, можна припустити, що добування електроенергії з відновлюваних джерел у світі та в Україні зросло приблизно у 3 рази протягом останніх десяти років. Аналізуючи отримані дані актуальним питанням є розробка пристроїв для накопичення, перетворення та транспортування електроенергії, які є необхідними для ефективного використання виробленої електроенергії. Таким чином акумуляторні батареї, електрохімічні конденсатори (ЕК) та окисно-відновні системи є найважливішими електрохімічними накопичувачами енергії. Велика увага приділяється електрохімічним конденсаторам, оскільки дані пристрої є високопотужнісними, мають тривалий термін роботи (більше  $10^4$  циклів) та кулонівська ефективність даних пристроїв прямує до 1. Для виготовлення електродів електрохімічних конденсаторів зазвичай використовують пористі вуглецеві матеріали (ПВМ). Високі питомі енергоємнісні параметри ЕК тісно пов'язані з фізичними і електрохімічними характеристиками ПВМ.

Нанопористі вуглецеві матеріали з високорозвиненою площею поверхні та контрольованим розподілом пор за розмірами отримують при хімічній та термічній активації вуглецевмісних прекурсорів. В даній роботі запропоновано спосіб отримання ПВМ із шкарлупи грецького горіха, методом термохімічної активації хлоридом цинку. Процес хімічної активації здійснювали поетапно: спершу шкарлупу грецьких горіхів карбонізували в діапазоні температур 375-425 °С, після чого отриманий карбоніат змішували з цинк хлоридом та водою у різних співвідношеннях; потім отриману суміш нагрівали до температури активації 700-900 °С при контрольованій швидкості 2-10 °С/хв; далі ізотермічно витримували протягом 30 при температурі активації; і охолоджували до кімнатної температури та відмивали до нейтрального рН і висушували.

Методом низькотемпературної адсорбційної порометрії становлено взаємозв'язок між параметрами пористої структури вуглецевих матеріалів, концентрацією хімічного активатора та температурою термохімічної активації. В ході експериментів отримано ПВМ із розміром пор в межах 0,5 - 20 нм та питомою площею поверхні в діапазоні 600 – 1500 м<sup>2</sup>/г. Концентрація хімічного активатора та температура активації є важливим фактором який впливає на морфологію та пористу структуру отриманого матеріалу.





## ESTABLISHMENT OF FORMATION MECHANISMS FOR OPTICAL AND ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF NANOFILMS OF CdS

**Valeriya Boshernitsan**

University of Algarve, Faro, Portugal, e-mail vallerchic@gmail.com

The physical and chemical properties of CdS nanoparticles were studied. The samples were obtained by the method of colloidal chemistry in aqueous gelatin solution. The findings show that the nanoparticle size depends on the properties of the stabilizer (gelatin host matrix). Upon decreasing concentration of the stabilizer, the particle size decreases. Long-term storage (several weeks) of colloidal solutions of CdS nanocrystals in ambient leads also to a narrowing of the particle size distribution, which we name here "size focusing". An increase in the absorption capacity of nanocrystals is observed and the luminescence intensity increases. Quantum-size effects were observed.

The experimental data presented in the current work shows a significant effect of interphase surface processes on the absorption and luminescence. Photoluminescence studies showed that the change in the average radius of cadmium sulfide nanocrystals from 3.4 nm to 11 nm significantly affects the spectrum of their radiation, namely, due to the larger ratio of surface to volume in nanocrystals of smaller size, do not observe zone-zone, or exciton, luminescence. In larger nanocrystals, the contribution of surface recombination decreases, and the presence of a short-wavelength band indicates a competitive advantage of the recombination channel. It is associated with recombination in the volume of cadmium sulfide nanocrystals over surface recombination.



## FIRST PRINCIPLES INVESTIGATION OF SENSING PROPERTIES OF SINGLE-WALLED ZnO NANOTUBES

**Pavlo Tkach, Mariya Kovalenko, Oleg Bovgyra**

Faculty of Physics, Ivan Franko National University of Lviv,  
8a, Kyrylo and Mefodiy, 79005 Lviv, Ukraine

[pavlo.tkach@lnu.edu.ua](mailto:pavlo.tkach@lnu.edu.ua)

Today, zinc oxide (ZnO) is one of the most important semiconductors for various applications in nanodevices due to its unique properties like wide bandgap (3.37 eV at 300 K), large exciton binding energy (60 meV) at room temperature, transparently in the visible region, non-toxicity, biocompatibility. Also, ZnO has the richest family of nanostructures including nanowires, nanotubes, nanoribbons, nanobelts, nanorings, nanoclusters, etc. These ZnO nanostructures have been often utilized as gas sensors for the detection of different gases such as NH<sub>3</sub>, NO, F<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, and CO. Single-walled ZnO nanotubes (ZnONT) can serve as a good template to study ZnO nanostructures theoretically. The high surface-to-volume ratio of ZnO-based nanostructures may be investigated for hydrogen storage and gas sensors. Also, ZnONTs are wide bandgap semiconductors and their properties can be changed according to the chiralities.

In this study, we present density functional theory (DFT) calculations of the structural and electronic properties of ZnO nanotube in different chiralities with different gas adsorbates (methane, ethane, NO, NO<sub>2</sub>, sulphur mustard and sarin gas). All types of studied adsorbed molecules are highly toxic even at low concentrations in the air, so they are of great interest for research. For example, methane is an odorless and colorless gas that is widely used in our daily life and may lead to a strong explosion if its concentration reaches 4% in dry air while mustard gas is one of the main chemical armaments. It should also be noted that there is an extremely small number of such studies, both experimental and theoretical. The purpose of this work is to understand how the electronic structure of ZnONT changes under the influence of adsorbed gas molecules on the surface of the nanotube.

Density functional GGA(PBEsol) with Hubbard corrections (GGA+U) was used to describe the exchange-correlation energy of the electronic subsystem. As a model objects were selected (5,5) and (8,0) ZnO nanotubes. The vacuum space around the ZnONT is large enough to prevent the interaction between adjacent replicas. The Brillouin zone samplings were performed using a 1×1×8 Monkhorst-Pack grid.

The calculations results show that after structure relaxation ZnO nanotubes have tubular structures in which zinc and oxygen atoms were slightly shifted inward and outward to the axis, forming homocentric cylinders with different diameters similar to carbon nanotubes. The electronic structure calculations show that all ZnO nanotubes are wide bandgap semiconductors with a bandgap bigger than wurtzite ZnO. Theoretical calculations of the adsorption energy showed that all molecules on the surfaces of ZnO nanotubes are stable systems, as indicated by the negative value of the adsorption energy for all nanotubes, regardless of chirality. Equilibrium distances between molecular adsorbates and surface nanotubes were established for all investigated systems. The adsorption of some gas molecules on ZnONT can cause significant change in electronic and transport properties of nanotube due to the charge transfer, which is confirmed by data from the Mulliken populations analysis. We hope that our results will be useful for further application of ZnO nanotubes as gas sensor.



## ПЕРШОПРИНЦИПНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ЛОКАЛЬНОЇ СТРУКТУРИ, ЕЛЕКТРОННИХ ТА ОПТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ КРИСТАЛІВ $\text{Pb}[(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})_x\text{Ti}_{1-x}]\text{O}_3$

**Олег Козаченко, Олег Бовгира, Марія Коваленко**

Фізичний факультет, Львівський національний факультет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 8 79005 Львів, Україна

[oleh.bovhyra@lnu.edu.ua](mailto:oleh.bovhyra@lnu.edu.ua)

Сегнетоелектричні тверді розчини на основі перовскітів інтенсивно досліджуються останнім часом, оскільки вони демонструють багато цікавих структурних і діелектричних властивостей, які роблять їх придатними для застосування в різноманітних електронних пристроях. Встановлення зв'язку між макроскопічними властивостями таких матеріалів та мікроскопічними властивостями складових атомів є важливим науковим завданням і має вирішальне значення для розумного проектування нових матеріалів із покращеними властивостями. Тверді розчини  $\text{Pb}[(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})_x\text{Ti}_{1-x}]\text{O}_3$  (PMN-PT) і  $\text{Pb}[(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})_x\text{Ti}_{1-x}]\text{O}_3$  (PZN-PT) є гарними об'єктами для дослідження кореляції між структурою та властивостями завдяки наявності достатньої кількості експериментальних даних. Проте, на сьогодні існує лише декілька досліджень проведених в межах теорії функціоналу густини (DFT), які зосереджувалися на зв'язку між локальною структурою та електронними властивостями таких сполук. Тому для кращого розуміння властивостей сполуки PMN-PT ми провели першопринципні дослідження їхнього локального атомного оточення та електронних і оптичних властивостей. Періодичні DFT розрахунки проведено з використанням псевдопотенціального плоскохвильового методу, реалізованого в програмному пакеті CASTEP. Обмінно-кореляційний функціонал представлено за допомогою наближень GGA(PBE) та GGA(PBE+U).

Аналіз локальної структури показує, що іони Pb зазнають найбільшого зміщення на 0,395 Å від своїх початкових положень, рухаючись до поверхні Mg-Nb і обминаючи поверхню Ti-Nb. Іони Nb і Ti рухаються у тому ж напрямі, що й іони Pb, а іони Mg лише незначно зміщуються. З аналізу видно, що атоми Nb і Ti переміщуються від центру на 0,18–0,22 Å, що приводить до формування коротших зв'язків між Nb–O і Ti–O, при цьому вносячи вирішальний внесок у макроскопічну поляризацію. Після оптимізації структури проведено дослідження електронної структури сполуки PMN-PT для кращого розуміння властивостей такої системи. Розрахована з використанням наближення GGA(PBE) ширина забороненої зони становить 2,11 eV, що занижено порівняно з експериментальним значенням (3,24 eV [1]) і є добре відомою проблемою розрахунків GGA. З метою отримання точніших електронних структур, на основі аналізу походження електронних станів та їхнього енергетичного положення проведено підбір параметрів Габбарда U. Врахування трьох поправок Габбарда дозволяє точніше розрахувати значення ширини забороненої зони і отримати значення 3,23 eV, яке добре узгоджується з експериментальним [1].

Робота виконана в рамках проекту 2020.02/0130 «Багатофункціональні органічно-неорганічні магнітоелектричні, фотовольтаїчні і сцинтиляційні матеріали» (реєстр. № 0120U104913) за грантової підтримки Національного фонду досліджень України.

[1] X. Wan, H.L. W. Chan, C.L. Choy, X. Zhao and H. Luo, J. Appl. Phys., **96**, 1387 (2004).



**СЕКЦІЯ D**

***КВАНТОВА ТЕОРІЯ, КВАНТОВА ІНФОРМАТИКА***

**SECTION D**

***QUANTUM THEORY, QUANTUM INFORMATICS***



## THE ROLE OF CLUSTER POLARIZATION IN THE FORMATION AND STRUCTURE OF THE ${}^6\text{Li}$ NUCLEI

**Nursultan Kalzhigitov<sup>1</sup>, Victor Vasilevsky<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Al-Farabi Kazakh National University, 71 al-Farabi Avenue, Almaty, 050040, Kazakhstan, [knurto1@gmail.com](mailto:knurto1@gmail.com)

<sup>2</sup>Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, 14-b Metrolohichna str., Kyiv, 03143, Ukraine, [vsvasilevsky@gmail.com](mailto:vsvasilevsky@gmail.com)

The  ${}^6\text{Li}$  nucleus occupies an important role in many domains of modern science, both in the field of nuclear physics and in the branches of nuclear astrophysics. One striking example of a still unsolved problem involving this nucleus is the astrophysical lithium problem in the theory of primordial nucleosynthesis [1]. At present, the process of  ${}^6\text{Li}$  nucleus formation at the initial stage of the nascent Universe is a topic for many theoretical and experimental studies. In this regard, the results from the section of nuclear physics about the peculiarities of the structure of this nucleus and the factors affecting its formation, are important for astrophysical applications. Among such factors affecting the formation and structure of the  ${}^6\text{Li}$  nucleus, the effects of cluster polarization should be singled out. Cluster polarization is a process in which light atomic nuclei with low binding energy change their size and shape when they are affected by other nuclei. There is another factor which attracts attention to this object. As it is known, the  ${}^6\text{Li}$  nucleus has an interesting structure containing two sets of resonance states. The first set, consisting of two narrow and three wide resonant states of only positive parity, forms low-energy resonant states lying near the threshold of  $\alpha+d$  decay. The second set of resonant states consists of high-energy negative-parity resonances above the  ${}^3\text{H}+{}^3\text{He}$  decay threshold. Various microscopic and semi-microscopic models have been used to study these resonance states in  ${}^6\text{Li}$ . These models have been used to study either only high-energy resonant states or only low-energy states. In the present work, we study both sets of resonant states within the framework of one three-cluster microscopic model, the basis of which was formulated in [2]. This model reduces the three-cluster problem to a system of binary channels and makes it possible to take into account cluster polarization, providing a more accurate description of weakly coupled two-cluster subsystems. For the  ${}^6\text{Li}$  nucleus, two three-cluster configurations were chosen,  $\alpha+p+n$  and  ${}^3\text{H}+d+p$ . They enable us to take into account all the dominant binary channels in  ${}^6\text{Li}$ , namely, the  $\alpha+d$ ,  ${}^5\text{He}+p$ ,  ${}^5\text{Li}+n$ , and  ${}^3\text{H}+{}^3\text{He}$  channels, and thus more realistically investigate the states of the  ${}^6\text{Li}$  nucleus in a large energy range.

Our investigations demonstrate that the cluster polarization plays an important role in the formation of the spectrum of the  ${}^6\text{Li}$  nucleus, it shifts the energy of the ground state and the  $3^+$  resonance state by more than 1 MeV. Besides, the cluster polarization significantly reduces the energies and widths of all available resonant states. A hierarchy of channels is established according to their influence on the parameters of the ground and resonant states. It is also shown that the theoretical results are in good agreement with the experimental data.

[1] B.D. Fields, *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.*, **61** (2011), p. 47.

[2] V.S. Vasilevsky, F. Arickx, et al., *Nucl. Phys. A*, **824** (2009), p. 37.



# ЗНАХОДЖЕННЯ ЕНЕРГІЇ ОСНОВНОГО СТАНУ АНГАРМОНІЧНОГО ОСЦИЛЯТОРА У КВАНТОВАНОМУ ПРОСТОРІ З ВИКОРИСТАННЯМ УЗАГАЛЬНЕНОГО СПІВВІДНОШЕННЯ НЕВИЗНАЧЕНОСТЕЙ

Арсен Панас

Львівський національний університет імені Івана Франка, вул.  
Університетська 1, м. Львів, 79000, [arsen.panas2002@gmail.com](mailto:arsen.panas2002@gmail.com)

Розвиток теорії петльової квантової гравітації призвів до відмови від концепції неперервного простору-часу на користь моделі мінімальної довжини. На практиці врахування мінімальної довжини можна досягти введенням малих додатних параметрів до канонічного комутативного співвідношення координати і імпульсу.

В цій роботі розглянуті моделі гармонічного осцилятора і ангармонічного осцилятора з використанням узагальнених комутаційних співвідношень

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar(1 + \beta \hat{p}^2). \quad (1)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar(1 + \alpha \hat{x}^2). \quad (2)$$

Мінімальна енергія гармонічного осцилятора співпадає з точним розв'язком знайденим через рівняння Шредінгера[1]. В границі параметрів  $\alpha \rightarrow 0$  і  $\beta \rightarrow 0$  результати отримані для ангармонічного осцилятора переходять у ті, що отримані без урахування мінімальної довжини. Запропонований метод може бути використаний для знаходження енергії основного стану інших систем.

[1] VM Tkachuk, C Quesne, Harmonic oscillator with nonzero minimal uncertainties in both position and momentum in a SUSYQM framework, J. Phys. **36**, 10373 (2003), p. 8.



## ВЛАСТИВОСТІ ВИСОКОЗБУДЖЕНИХ РЕЗОНАНСНИХ СТАНІВ У ДЗЕРКАЛЬНИХ ЯДРАХ ${}^9\text{Be}$ ТА ${}^9\text{B}$

**Віктор Жаба, Віктор Василевський, Юлія Лашко**

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова, вул. Метрологічна 14-б,  
м. Київ, Україна, 03143, e-mail: viktorzh@meta.ua

Для дослідження природи високозбуджених резонансних станів дзеркальних ядер  ${}^9\text{Be}$  та  ${}^9\text{B}$  сформульовано мікроскопічну багатокластерну модель, яка є удосконаленою версією метода резонуючих груп. Як відомо, метод резонуючих груп – це головний інструмент дослідження кластерної структури легких ядер. Сформульована модель дозволяє враховувати всі домінуючі бінарні канали синтезу та розпаду досліджуваних ядер. В цій моделі (її позначаємо як АМГОБ [1-3]) залучається гаусівський та осциляторний базиси для опису внутрішньої структури бінарних систем та їх асимптотичної поведінки.

Для опису ядерної структури та реакцій в АМГОБ ми використовуємо багатоконфігураційний підхід, враховуючи в ядрі  ${}^9\text{Be}$  такі трикластерні конфігурації як  $\alpha + \alpha + n$  і  $\alpha + {}^3\text{H} + d$ . Трикластерні конфігурації в ядрі  ${}^9\text{B}$  будуть  $\alpha + \alpha + p$  і  $\alpha + {}^3\text{He} + d$ . За допомогою таких трикластерних конфігурацій можливо залучати бінарні канали. Наприклад, в ядрі  ${}^9\text{Be}$  – це канали  ${}^8\text{Be} + n$ ,  ${}^5\text{He} + \alpha$ ,  ${}^7\text{Li} + d$  і  ${}^6\text{Li} + t$ ; а в ядрі  ${}^9\text{B}$  – це канали  ${}^8\text{Be} + p$ ,  ${}^5\text{Li} + \alpha$ ,  ${}^7\text{Be} + d$  і  ${}^6\text{Li} + {}^3\text{He}$ . Вказані трикластерні конфігурації в дзеркальних ядрах  ${}^9\text{Be}$  та  ${}^9\text{B}$  дозволяють більш коректно описувати внутрішню структуру ядер  ${}^8\text{Be}$ ,  ${}^5\text{He}$ ,  ${}^5\text{Li}$ ,  ${}^7\text{Li}$ ,  ${}^7\text{Be}$  і  ${}^6\text{Li}$ , оскільки останні розглядаються як двокластерні системи  $\alpha + \alpha$ ,  $\alpha + n$ ,  $\alpha + p$ ,  $\alpha + {}^3\text{H}$ ,  $\alpha + {}^3\text{He}$ ,  $\alpha + d$ , відповідно.

Модель АМГОБ дозволяє досліджувати природу резонансних станів в широкому інтервалі енергій. Основна увага в даних дослідженнях приділяється резонансам, які знаходяться в околі порогів розпаду  ${}^7\text{Li}+d$ ,  ${}^6\text{Li}+{}^3\text{H}$  в ядрі  ${}^9\text{Be}$  та  ${}^7\text{Be}+d$ ,  ${}^6\text{Li}+{}^3\text{He}$  в ядрі  ${}^9\text{B}$ , оскільки в цьому діапазоні енергій були виявлені найбільш вузькі резонансні стани.

Основними результатами нашого дослідження є:

1. Розраховано фази пружного та непружного  ${}^7\text{Li}+d$ ,  ${}^6\text{Li}+{}^3\text{H}$ ,  ${}^8\text{Be}+n$  ( ${}^7\text{Be}+d$ ,  ${}^6\text{Li}+{}^3\text{He}$ ,  ${}^8\text{Be}+p$ ) розсіяння для ядра  ${}^9\text{Be}$  (і  ${}^9\text{B}$  відповідно).

2. Визначено параметри (енергію та ширину) високозбуджених резонансів (резонансів із енергією  $E \geq 13$  MeV над основним станом) ядер  ${}^9\text{Be}$  та  ${}^9\text{B}$ . Встановлено домінуючі канали їх розпаду.

3. Розраховано астрофізичні S-фактори реакцій  ${}^7\text{Li}(d,n){}^8\text{Be}$ ,  ${}^7\text{Li}(d,\alpha){}^5\text{He}$ ,  ${}^7\text{Be}(d,p){}^8\text{Be}$ ,  ${}^7\text{Be}(d,\alpha){}^5\text{Li}$ . Теоретичні розрахунки порівнюються з експериментальними даними.

Показано, що отримані в моделі АМГОБ результати задовільно узгоджуються із результатами теоретичних та експериментальних робіт, присвяченим вивченню високозбуджених резонансних станів у дзеркальних ядрах  ${}^9\text{Be}$  та  ${}^9\text{B}$ .

[1] Y.A. Lashko, G.F. Filippov, and V.S. Vasilevsky, Nucl. Phys. A, **958**, 78 (2017).

[2] V.S. Vasilevsky, F. Arickx, J. Broeckhove, and T.P. Kovalenko, Nucl. Phys. A, **824**, 37 (2009).

[3] A.V. Nesterov, V.S. Vasilevsky, and T.P. Kovalenko, Phys. At. Nucl., **72**, 1450 (2009).





## ВИМІРЮВАННЯ ЗАПЛУТАНОСТІ НА КВАНТОВОМУ КОМП'ЮТЕРІ

**Петро Сапріяничук, Христина Гнатенко**

Кафедра теоретичної фізики імені професора Івана Вакарчука  
Львівського національного університету імені Івана Франка,  
м. Львів, вул. Драгоманова 12, 79005

У нашій роботі ми розглянули узгодженість як міру запутаності загального двокубітового стану. Встановлено залежність між параметрами загального стану двокубітної системи з його узгодженістю аналітично та за допомогою квантових обчислень на квантовому комп'ютері IBM Lima [1]. Результати квантових обчислень добре узгоджуються з теоретичними розрахунками.

Для станів:

$$|\chi\rangle = \cos(\theta/2) |01\rangle + \sin(\theta/2) |10\rangle, \quad (1)$$

$$|\varphi\rangle = \cos(\theta/2) |00\rangle + \sin(\theta/2) |11\rangle \quad (2)$$

залежності узгодженості від параметра  $\theta$ , обчислені на квантовому комп'ютері компанії IBM, мають вигляд:

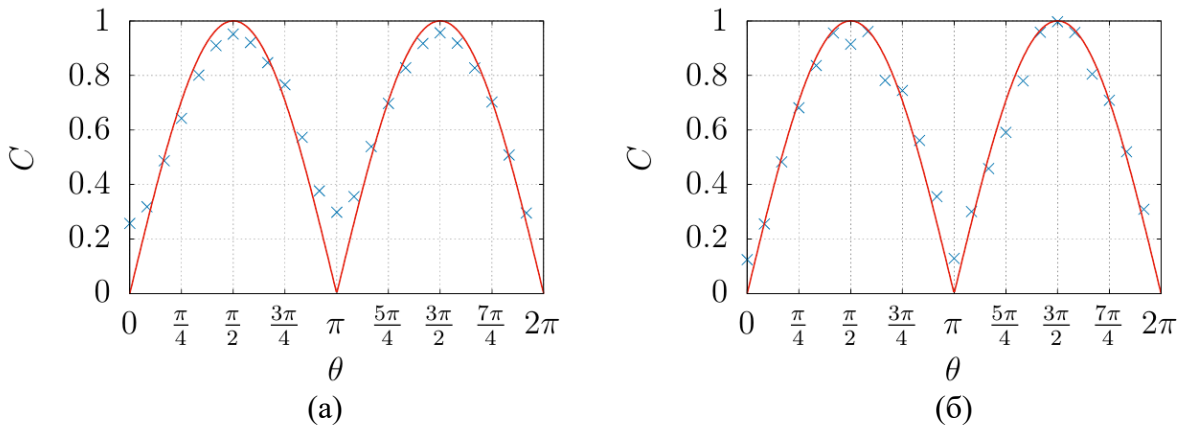


Рис. 1: Експериментальні значення узгодженості для стану (1) (а), і для стану (2) (б) для різних значень параметра  $\theta$  обчислені на квантовому комп'ютері IBM Lima (позначено хрестиками) та теоретичні результати (неперервна лінія).



## ЗАПЛУТАНІСТЬ СПІНУ $S = 1$ З ІНШИМИ СПІНАМИ У ГРАФОВОМУ СТАНІ

**Колесник Ростислав**

Львівський національний університет імені Івана Франка, фізичний  
факультет, кафедра теоретичної фізики імені професора Івана Вакарчука,  
вул. Драгоманова 12, 79005, Львів, Україна.  
rst.koles@gmail.com

Знайдено заплутаності спіну  $S = 1$  з іншими спінами у графовому стані враховуючи його ступінь вузла. Заплутаності знайдено використовуючи ентропію фон Неймана для ступенів вузла  $k = 1, 2, 3$ . Ступінь вузла  $k = 1$  ми утворюємо за допомогою оператора еволюції  $U_{12} = \exp(i\alpha S_1^x S_2^x)$  подіявши ним на початковий стан  $|\psi_0\rangle = |000\dots 0\rangle$ . Ступені вузла вищого порядку утворюємо добутком подібних операторів еволюції. Оскільки такі оператори еволюції комутують між собою, то ми можемо діяти ними на початковий стан  $|\psi_0\rangle$  в довільному порядку. Виявлено, що матриця густини для досліджуваного спіну у графовому стані завжди зводиться до однакової форми. Побудовано залежність заплутаності від параметра еволюції для кожного ступеня вузла. Знайдено середню заплутаність для усіх ступенів вузла та побудовано залежність середньої заплутаності від ступеня вузла.



## ЗАСТОСУВАННЯ МОДЕЛІ ПОТЕНЦІАЛІВ НУЛЬОВОГО РАДІУСУ ДО ОБЧИСЛЕННЯ СПЕКТРІВ НАНОРОЗМІРНИХ СИСТЕМ

**Станіслав Кузьмін, Вадим Адамян**

ОНУ ім. І.І. Мечникова, вул. Дворянська 2, 65082, м. Одеса, Україна,  
stanislav.kuzmin@stud.onu.edu.ua

Роботу присвячено важливій проблемі створення ефективного методу дослідження електронної структури молекул і штучних багатоатомних з'єднань на основі розв'язуваної моделі потенціалів нульового радіусу. В ній на прикладі різних молекулярних структур, зокрема молекул метану та аміаку, показано як за допомогою цієї моделі, знаючи енергії іонізації складових атомів певної молекули, геометрію її іонного остову, в результаті достатньо елементарних обчислень визначити значення енергію іонізації цієї молекули.

При виробі правил включення індивідуальних характеристик складених систем в модель потенціалів нульового радіусу результати роботи дозволяють розвинути простий метод опису електронних властивостей не лише простих молекул, але й квантових точок, низькорозмірних провідників тощо.

- [1] F.A. Berezin and L.D. Faddeev, Remarks on the Schrödinger equation with singular potential, Doklady Akad. Nauk SSSR, 137, (1961), 1011 – 1014
- [2] Bethe, H., Peierls, R.: Quantum theory of the dipole. Proc. Roy. Soc. (London) 148A (1935), 146-156.
- [3] Wigner, E.: On the mass defect of helium. Phys. Rev. 43 (1933), 252-257.
- [4] Thomas, L. H.: The interaction between a neutron and a proton and the structure of H<sub>3</sub>. Phys. Rev. 47 (1935), 903-909.
- [5] Fermi, E.: SuI moto dei neutroni nelle sostanze idrogenate (In Italian). Ricerca Scientifica 7 (1936), 13-52. English translation in E. Fermi Collected Papers, Vol. I, Italy, 1921-1938. University of Chicago Press, Chicago-London, 1962, pp. 980-1016.
- [6] Yu. N. Demkov and V.N. Ostrovsky, Zero-range Potentials and their Applications in Atomic Physics, Plenum, New York, 1988
- [7] Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase, Standard Reference Database, Release 21 (August 2020) National Institute of Standards and Technology, CCCBDB introduction navigation (nist.gov)
- [8] Mathematica's ElementData function from Wolfram Research, Inc., <https://periodictable.com/Elements/001>
- [9] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn, and H. Holden, Solvable models in quantum mechanics. Texts and Monographs in Physics. 2nd edition, AMS-Chelsea Series, Amer. Math. Soc., 2005
- [10] V. Adamyan. Singular perturbations of unbounded selfadjoint operators. Reverse approach. Operator Theory: Advances and Applications, 276 (2020), 63 – 79





**СЕКЦІЯ Е**

***ФІЗИКА КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ***

**SECTION E**

***PHYSICS OF CONDENSED SYSTEMS***



# APPLICATION OF THE LATTICE GAS MODEL TO THE SURFACE TENSION OF MOLECULAR FLUIDS

**Anastasiia Maslechko**

Odesa National Mechnikov University, Dvoryans'ka St, 2, Odesa, 65082,  
maslechko.an@gmail.com

In this work the recently developed approach of global isomorphism (Kulinskii transformation [1]) of the fluid and the lattice gas is used to determine the surface tension for the Lennard-Jones liquid based on the relevant characteristics of the Ising model. This approach makes it possible to reproduce the temperature behavior of the surface tension in a wide range of temperatures in both two-dimensional and three-dimensional systems.

For 2D systems, the exact Onsager solution of the Ising model is used. The Kulinskii transformation is based on the representation of the binodals for the fluid and the lattice model in the following form:

$$n(x, t) = n_* \frac{x}{1+z \frac{t}{t_{crit}}} \quad (1)$$

$$T(t) = T_* \frac{\frac{t}{t_{crit}}}{1+z \frac{t}{t_{crit}}} \quad (2)$$

Here in Eqs.1-2 parameters  $x$  and  $t$  are density and temperature of the lattice gas respectively,  $n$  and  $T$  are relevant parameters of the fluid;  $n_*$  and  $T_*$  define Zeno-element (Eq. 3) and  $z$  is a parametrization coefficient which is dependent on  $T_*$  and  $T_{crit}$  (Eq. 4) and as a result, changes its value only on the dimension of the model:

$$\frac{n}{n_*} + \frac{T}{T_*} = 1 \quad (3)$$

$$z = \frac{T_{crit}}{T_* - T_{crit}} \quad (4)$$

The width of the surface is also an important integral characteristic for describing the coexistence of different phases. In this approach, the characteristic thickness of the surface is also completely determined by the correlation length of the Ising model:

$$\Delta(T) = \xi_{Ising}(t(T))/a_{\Delta}, \quad (5)$$

where  $a_{\Delta}$  is a scale parameter that does not depend on temperature. This allows us to reproduce the correct critical asymptotic of the surface tension:

$$\sigma \propto |\tau|^{D \cdot \nu}, \quad \tau \rightarrow 0, \quad \tau = \frac{T - T_{crit}}{T_{crit}}. \quad (6)$$

The results obtained agree with known experimental data on the surface tension of the real and model liquids [2].

[1] V.L Kulinskii. J. Chem. Physics, **133**, 034121 (2010).

[2] A. Maslechko, K. Glavatskiy, V.L. Kulinskii, J. Mol. Liquids, **235** (2017).



## ЗАЛЕЖНІСТЬ ДІЕЛЕКТРИЧНОЇ ПРОНИКНОСТІ ВІД ГУСТИНИ ДЛЯ ПРОСТИХ ГАЗІВ ТА РІДИН

Вікторія Набуральна

Одеський Національний університет імені І.І. Мечникова,  
вул. Дворянська 2, м. Одеса, 65026, Україна, naburalnav@gmail.com

Загальноприйнято вважати, що діелектрична проникність атомарних газів і рідин типу аргону описується формулою Клаузіуса-Моссотті:

$$\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} = \frac{4\pi}{3} n\alpha \quad (1)$$

де  $\alpha$  – атомна поляризованість, а  $n$  – чисельна щільність. Застосування цієї формули до експериментальних даних для аргону [1-2] приводить до наступних основних результатів:

$$\alpha = \begin{cases} 0,035/n_{tr}, & n \ll n_{tr}, \\ 0,062/n_{tr}, & n \leq n_{tr}, \end{cases} \quad (2)$$

де  $n_{tr}$  – чисельна щільність аргону у потрійній точці. Іншими словами, атомна поляризованість є функцією щільності і, крім того, вона також слабо залежить від температури.

Основною метою цієї роботи є пояснення залежності ефективної поляризованості від густини для атомів аргону та інших атомарних газів та рідин.

Для цієї мети нами розробляється теорія діелектричної проникності, яка оперує з одно-, дво-, трьох-, чотиричастинковими внесками в поляризованість та внесками більш високих порядків. Зокрема, у двочастинковому наближенні діелектрична проникність інертного газу описується формулою:

$$\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} = \frac{4\pi}{3} n \left( \alpha + \frac{1}{6} n \int d\vec{r}_{12} \left( \alpha_i^{(2)}(r_{12}) + 2\alpha_t^{(2)}(r_{12}) \right) g(r_{12}) + \dots \right) \quad (3)$$

де  $\alpha_i^{(2)}(r_{12})$  та  $\alpha_t^{(2)}(r_{12})$  – поздовжні та поперечні складові незвідної частини бінарної поляризованості,  $g(r_{12})$  – бінарна функція розподілу. З відповідною точністю формулу можна перетворити:

$$\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} = \frac{4\pi}{3} \tilde{n}\tilde{\alpha} \left[ 1 + \frac{8\pi}{3} \tilde{n}\tilde{\alpha}^2 \left( 1 + \frac{3g_M}{\sigma} \right) + \dots \right] \quad (4)$$

Де  $\tilde{\alpha} = \alpha n_{tr}$ ,  $\tilde{n} = n/n_{tr}$ ,  $g_M$  – висота першого піку для  $g(r_{12})$ . Залежність  $\alpha$  від густини стає очевидною.

[1] P. Laporte, J. L. Subtil, Evolution of intermediate excitons in fluid argon and krypton, The American Physical Society (1987), p. 6270.

[2] Y. Kano, N. Kuramoto, Gaseous density calculation by means of relative permittivity measurement, Measurement: Sensors 18 (2021).





# МОДЕЛЮВАННЯ ДЗЕТА-ПОТЕНЦІАЛУ МАКРОМОЛЕКУЛ СИРОВАТКОВОГО АЛЬБУМІНУ У ВОДНО-СОЛЬОВИХ РОЗЧИНАХ ЗА ДОПОМОГОЮ КОМІРКОВОЇ МОДЕЛІ

**Оксана Столярик, Олексій Хорольський**

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова,  
вул. Дворянська, 6, Одеса, 65026, [adiabata384@gmail.com](mailto:adiabata384@gmail.com)

Робота присвячена побудові ефективної коміркової моделі дзета-потенціалу макромолекули сироваткового альбуміну людини у водних розчинах хлориду натрію, яка враховує зміну концентрації солі, температури та рН водного оточення. Хоча дослідженню структури альбуміну у водних розчинах присвячено значну кількість робіт, проте єдина картина зв'язку структури та електрофізичних властивостей макромолекули альбуміну зі зміною вказаних параметрів водних розчинів наразі відсутня [1].

При потраплянні альбуміну у водно-сольовий розчин відбувається взаємодія бічних частин амінокислотних залишків макромолекули з молекулами води і солей та приєднання або втрата макромолекулою іонів водню. Внаслідок цього відбувається перерозподіл електричних зарядів на поверхні молекули та у розчині. Навколо молекули виникає хмара позитивних і негативних зарядів, що шарами замінюють один одного – утворюється подвійний електричний шар, який повністю екранує заряд молекули. Тому на деякій відстані потенціал поля дорівнюватиме нулю. Отже, усю систему можна розбити на сукупність однакових областей – комірок, на межах яких потенціал поля дорівнює нулю.

Застосовуючи рівняння Пуассона ( $\Delta\varphi = -4\pi\rho$ ) для макромолекули альбуміну у водному розчині хлориду натрію за фізіологічного інтервалу температур ( $e\varphi \ll k_B T$ ), враховуємо, що на межі комірки потенціал поля дорівнює нулю, а потенціал поля на поверхні молекули визначається поверхневою густиною зарядів  $\sigma$ . Оскільки за означенням дзета-потенціалу  $\zeta = \varphi(r_{alb}) - \varphi(r_c)$  і  $\varphi(r_c) = 0$ , то дзета-потенціал буде визначатися потенціалом на поверхні молекули альбуміну:

$$\zeta = \varphi(r_p) = \frac{K}{r_{alb}} \left( \exp\left(\frac{r_c - r_{alb}}{r_D}\right) - \exp\left(-\frac{r_c - r_{alb}}{r_D}\right) \right), \quad (1)$$

$$K = \frac{4\pi\sigma}{\varepsilon} r_{alb}^2 r_D \left( (r_{alb} - r_D) \exp\left(\frac{r_{alb} - r_c}{r_D}\right) + (r_{alb} + r_D) \exp\left(-\frac{r_{alb} - r_c}{r_D}\right) \right)^{-1}, \quad (2)$$

де  $r_{alb}$  – радіус молекули альбуміну у розчині,  $r_D$  – радіус Дебая водного розчину хлориду натрію (фізіологічний розчин),  $r_c$  – радіус комірки.

Отримані результати добре корелюють з експериментальними даними та дозволяють враховувати вплив концентрації солі, температури та рН на величину дзета-потенціалу макромолекули сироваткового альбуміну людини у водно-сольових розчинах.



## СЕГРЕГАЦІЯ ЕЛЕМЕНТІВ У БІНАРНИХ ПЛІВКАХ ПІД ЧАС ЇХ ВАКУУМНОГО ВІДПАЛЮВАННЯ

Тамара Сухова<sup>a</sup>, Сергій Дукаров<sup>a</sup>, Сергій Петрушенко<sup>ab</sup>,  
Олександр Невгасимов<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Фізичний факультет, площа Свободи 4, Харків

<sup>b</sup>Technical University of Liberec, Institute for Nanomaterials, Advanced Technologies and Innovation, 460 01 Liberec, Czech Republic,  
petrushenko@karazin.ua

Відпалювання однокомпонентних плівок супроводжується двома процесами: рекристалізацією, яка збільшує розмір структурних елементів суцільного шару та диспергуванням, яке перетворює суцільну плівку на острівцеву. Рекристалізація превалює за температур, що є невисокими порівняно з температурою плавлення. При наближенні до температури плавлення інтенсифікуються процеси диспергування, які зумовлюють зростання в плівці наскрізних пор і подальше утворення острівцевої структури. Більш складним є диспергування бінарних плівок, у яких можуть спостерігатись процеси сегрегації елементів, тобто локальне порушення однорідності складу. В роботі наведено результати дослідження масоперенесення, яке відбувається при відпалюванні плівок In/Sn.

Об'єкти дослідження отримували методом зразків змінного складу та змінного стану з послідовною конденсацією компонентів. Метод змінного складу заснований на використанні особливої геометрії розташування випарників, підкладки та екранів. Це дозволяє в рамках одного вакуумного циклу отримати серію зразків з неперервною зміною складу. Після осадження вздовж підкладки в напрямі, що перпендикулярний градієнту концентрації, встановлюється градієнт температур, який підтримується певний час. Це забезпечує розгортку плівок різного складу за температурою. Отримані зразки вивчали у растровому електронному мікроскопі Tescan Vega 3 LMN, який оснащений енергодисперсійним спектрометром Bruker XFlash 5010. Рентгеноструктурні дослідження проведено з використанням ДРОН 3М

Встановлено, що фазові стани плівок різного складу із загальною товщиною 300 нм відповідають діаграмі стану масивних зразків контактної пари. Таким чином показано, що використання послідовної конденсації дозволяє для легкоплавких металів отримати зразки, які в середньому будуть однорідними та гомогенізованими по товщині. Однак при EDS дослідженнях встановлено наявність локалізованих порушень однорідності атомного складу отриманих плівок. Такі неоднорідності мають як випадковий характер, так і ототожнюються з порами, що зростають під час відпалювання.

Неоднорідності першого класу, що розташовані довільно на поверхні зразка, являють собою ділянки збагачені оловом та мають розмір біля 5 мкм. Неоднорідності другого класу збагачені індієм. Вони оточують пори, а їх ширина менша за 1 мкм. Порівняння елементних карт, отриманих від суцільних та острівцевих плівок, вказує на важливу роль неоднорідностей першого класу в розподілі за концентрацією частинок, що утворюються при диспергуванні плівок. Порушення складу, які супроводжують пороутворення, напевно не впливають на самовпорядковані масиви, що утворюються після плавлення. Однак утворення збагачених індієм ділянок є важливим на початкових етапах руйнування функціональних шарів і має бути враховано розробниками.



## ВНУТРІШНІЙ РОЗМІРНИЙ ЕФЕКТ КОЕФІЦІЄНТА ТЕПЛООВОГО РОЗШИРЕННЯ НАНОКРИСТАЛІЧНИХ ПЛІВОК СРІБЛА

Тамара Сухова<sup>a</sup>, Сергій Дукаров<sup>a</sup>, Сергій Петрушенко<sup>ab</sup>,  
Олександр Невгасимов<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Фізичний  
факультет, площа Свободи 4, Харків

<sup>b</sup>Technical University of Liberec, Institute for Nanomaterials, Advanced  
Technologies and Innovation, Department of Advanced Materials, 460 01  
Liberec, Czech Republic, petrushenko@karazin.ua

Явище теплового розширення тіл знаходить використання у системах вимірювання температури, терморегуляторах та захисних пристроях. Однак теплове розширення є й негативним явищем, яке стає фізичною причиною механічних напружень та руйнування функціональних елементів. Варто відзначити, що в цьому випадку основною причиною руйнування буде не стільки саме розширення, скільки відмінності в температурних коефіцієнтах розширення окремих компонентів пристрою. В цьому контексті важливого значення набувають дослідження, що забезпечують можливість керування тепловими властивостями тіл та їх адаптацію до особливостей конкретної пари.

Результати різноманітних досліджень вказують, що поведінка нанозразків може значно відрізнятись від масивного стану. Зазвичай такі ефекти спостерігаються на розрізаних частинках та обумовлені їх поверхнею. Однак вони можуть бути обумовлені й внутрішніми інтерфейсами, наприклад границями зерен полікристалічного шару. З огляду на структуру зразків такі явища можна називати внутрішніми розмірними ефектами. Очікується, що поряд з добре встановленими розмірними ефектами температури плавлення, розчинності та дифузійної активності, границі зерен сприятимуть зміні й температурного коефіцієнту розширення. Саме таке явище й досліджено в цій роботі.

Як об'єкт дослідження обрано тонкі плівки срібла, нанесені шляхом вакуумного осадження на свіжі сколи монокристалів КСІ. Одержані плівки переносили на електронно-мікроскопічні сіточки та досліджували методами просвітлювальної електронної мікроскопії та електроннографії. При електроннографічних вимірюваннях використано метод еталона, згідно якого на детекторі одночасно отримується дві електроннографічні картини: від досліджуваного та еталонного зразків. Це дозволяє врахувати можливі нестабільності прискорюючої напруги та підвищити точність вимірювання.

Відповідно до ТЕМ досліджень плівки, отримані конденсацією срібла на підкладку при кімнатній температурі, мають складну будову та складаються з нанометрових та мікронних кристалітів. Найбільш вірогідний розмір нанометрової фракції складає 25 нм. Показано, що завдяки нанокристалічній фракції теплове розширення плівок зменшується відносно табличного значення. Ефективний температурний коефіцієнт теплового розширення плівок срібла з бімодальним розподілом кристалітів за розмірами, визначений електроннографічно, складає  $5 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  та є приблизно втричі меншим за значення для масивного срібла. Він наближається до коефіцієнта теплового розширення кремнію та германію, що робить полікристалічні шари срібла зручним об'єктом для створення на їх поверхні функціональних структур.



# ДЗЕТА-ПОТЕНЦІАЛ І ЗАСТІЙНИЙ ШАР ЯК КЛЮЧОВІ ЕЛЕМЕНТИ ДЛЯ ПОБУДОВИ ТЕОРІЇ ЕЛЕКТРОПРОВІДНОСТІ СУСПЕНЗІЙ НАНОЧАСТИНОК

**Світлана Баліка**

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова,  
вул. Дворянська, 2, Одеса, Україна, 65026; e-mail:  
svitlana.balika@onu.edu.ua

Важливою електричною характеристикою частинок у суспензіях є їх  $\zeta$ -потенціал, який залежить від багатьох факторів – природи і заряду поверхні частинок, природи електроліту і розчинника, концентрації і рухливості іонів електроліту в розчині тощо – та є чутливим до наявності домішок у розчині. Визначення числового значення  $\zeta$ -потенціалу вимагає одночасного проведення щонайменше двох незалежних експериментів і застосування для їх обробки різних модельних теорій. Задача суттєво ускладнюється при дослідженні суспензій наночастинок (нанофлюїдів).

Стандартні електрокінетичні та електрофоретичні теорії мають ще один недолік – використання спрощеної моделі подвійного електричного шару (ПЕШ), згідно з якою він складається із шару Штерна (адсорбованих іонів, що прилягають до поверхні частинки) і рухливого дифузійного шару. Однак експериментальні дослідження та молекулярні симуляції [1] вказують, що дифузійний ПЕШ може також включати застійний шар – перехідну область між шаром Штерна і рухливою частиною дифузійного ПЕШ. Застійний шар вважається гідродинамічно нерухливим, але водночас електропровідним.

У даній роботі представлено результати [2] дослідження впливу ПЕШ, включно із застійним шаром, на ефективну провідність  $\sigma_{\text{eff}}$  суспензій непровідних частинок. Суспензія розглядається як дисперсна система частинок з морфологією тверде ядро-проникна оболонка. Для обчислення  $\sigma_{\text{eff}}$  використовується метод компактних груп неоднорідностей. Встановлено і протестовано функціональну залежність  $\sigma_{\text{eff}}$  від двох ключових параметрів –  $\zeta$ -потенціалу і відносної товщини застійного шару  $u^*$  (решта характеристик суспензії вважаються відомими).

У якості практичних застосувань показано, що знання (наприклад, з експерименту) тангенса кута нахилу концентраційної залежності  $\sigma_{\text{eff}}$  для розбавлених нанофлюїдів дозволяє встановити однозначний зв'язок між  $\zeta$  і  $u^*$ , тоді як  $u^*$  можна оцінити через гідродинамічний радіус частинки, знайдений, скажімо, методом лазерної кореляційної спектроскопії. Поєднання цих двох типів вимірювань дозволяє, з одного боку, запропонувати новий спосіб [3] визначення  $\zeta$ -потенціалу без використання теорій електрофорезу, а з другого, уникнути безпосереднього використання електрофоретичних значень  $\zeta$ -потенціалу для опису  $\sigma_{\text{eff}}$  помірно концентрованих нанофлюїдів.

[1] J. Lyklema, S. Rovillard and J. De Coninck. *Langmuir* **14**, 5659–63 (1998)

[2] M. Ya. Sushko and S. D. Balika. *Physica Scripta* **98**, 015812 (2023)

[3] С. Д. Баліка. *Фізика аеродисперсних систем* **60**, 143-152 (2022)



## МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ КРИСТАЛІЗАЦІЇ МЕТАЛЕВИХ СТЕКОЛ

**Тетяна Калініна, Антон Хлебніков, Владислав Бурзаєв, Ірина Комок**  
Дніпровський державний технічний університет, 51918, м. Кам'янське,  
вул. Дніпробудівська 2, Україна, e-mail: [khlebnikov.anton77@gmail.com](mailto:khlebnikov.anton77@gmail.com)

З використанням математичної моделі кристалізації швидкозагартованих аморфних матеріалів, яка враховує наявність у їх структурі так званих «гартівних зародків», виконано розрахунковий аналіз кінетики переходу структури металевих скла у рівноважний кристалічний стан при нагріванні. В моделі розглядаються 2 етапи формування структури, перший з яких відбувається в умовах гартування з рідкого стану (ГРС) і супроводжується кристалізацією малої частки об'єму, що не перевищує чутливості рентгенофазового аналізу ( $x_-^e \leq 10^{-2}$ ). За весь час охолодження розплаву  $t_-^e$  в одиниці об'єму рідкої фази утворюється  $N_-^e$  центрів кристалізації, які набувають середніх розмірів  $R_-^e$ . На другому етапі моделюються процеси кристалізації при нагріванні продуктів ГРС, які здійснюються як за рахунок росту гартівних зародків ( $x_{-+}^e, N_{-+}^e, R_{-+}^e$ ), так і шляхом зародження та подальшого росту нових кристалів ( $x_{++}^e, N_{++}^e, R_{++}^e$ ). Очевидно, що частки перетвореного об'єму, що утворюються за різними механізмами, зв'язані співвідношенням:

$$x_-^e + x_{-+}^e + x_{++}^e = 1 \quad (1)$$

Моделі розрахунки виконували для германію (Ge), який, згідно з даними [1], отримують у некристалічному стані при екстремальних режимах ГРС. Температурні залежності швидкостей зародження та росту кристалів, які входять у кінетичні рівняння моделі, задавали формулами класичної теорії кристалізації для механізмів гомогенного утворення кристалічних зародків та нормального росту кристалів. Енергетичний стимул кристалізації розраховували в припущенні лінійних температурних залежностей теплоємності материнської та кристалічної фаз. Залежність в'язкості розплаву від температури апроксимували емпіричним рівнянням Фогеля-Фулчера. Товщину  $l$  дослідних зразків змінювали від 0,15 до 1,1 мкм, що відповідає інтервалу значень швидкості охолодження  $v_-$  від  $3,2 \cdot 10^9$  до  $1,6 \cdot 10^8$  К/с.

Показано, що зі збільшенням товщини зразків Ge у заданих межах об'ємна частка кристалічної фази  $x_-^e$ , що фіксується в процесі ГРС зростає від рівня  $\sim 10^{-6}$ , котрий не виявляється експериментально, до  $\sim 1,6 \cdot 10^{-1}$ . Решта об'єму рідких шарів переохолоджується нижче температури  $T_g = 750$ К і твердне без кристалізації з утворенням аморфного стану.

Згідно з результатами другого блоку модельних розрахунків, швидкоохолодженні фольги товщиною до 1 мкм при нагріванні кристалізуються, головним чином, за рахунок зародження та росту нових кристалів. При подальшому збільшенні товщини шарів розплаву відносні внески двох конкуруючих механізмів кристалізації зближуються і в зразках товщиною 1,1 мкм домінуючим стає механізм росту вморожених центрів. Показано, що рівень конкурентоспроможності двох механізмів кристалізації аморфних фольг збільшується узгоджено із сумарною площею поверхні поділу кристалів даного типу з материнською фазою.

[1] Davies H.A. A non-crystalline phase in splat-quenching germanium / H.A. Davies, I.B. Hull // Scr. Metall. – 1973. – Vol.7. – P.637-642





## УМОВИ ФОРМУВАННЯ ТА СТРУКТУРА МЕТАСТАБІЛЬНОЇ МОДИФІКАЦІЇ ПРАЗЕОДИМУ

Тетяна Дорожка, Роман Бардадим,  
Катерина Шевелєва, Віталія Проноза

Дніпровський державний технічний університет, 51918, м. Кам'янське,  
вул. Дніпробудівська 2, Україна  
e-mail: [tndorozhka@gmail.com](mailto:tndorozhka@gmail.com)

Виконані рентгенографічні дослідження швидкозагартованих фольг празеодиму (Pr) різної товщини та зразків, які після гартування з рідкого стану (ГРС) зазнавали термічної обробки для досягнення рівноважного структурного стану. Показано, що при швидкостях ГРС, що перевищують критичне значення  $v_k \approx 5 \cdot 10^5$  К/с, в структурі металу, поряд з  $\gamma$ -модифікацією, яка має решітку гранецентрованого куба (ГЦК) з періодом  $a_{\gamma-Pr} = 0,5151$  нм, фіксується метастабільна  $\mu$ -фаза. При подальшому вакуумному відпалі ГРС-зразків рентгенографічні ознаки метастабільної складової зникають і в рентгенівських дифракційних картинах залишаються лише відбиття від рівноважних щільноупакованих модифікацій:  $\gamma$ -Pr (ГЦК) та  $\alpha$ -Pr з подвійною гексагональною компактною (ПГК) решіткою.

При обґрунтуванні структурної моделі та механізму утворення  $\mu$ -Pr виходили з того, що в умовах ГРС найбільшу конкурентоспроможність має ГЦК  $\gamma$ -модифікація. В процесі швидкого росту кристалів  $\gamma$ -Pr в їх структурі виникають дефекти пакування. Про високу імовірність здійснення цих процесів свідчать мінімальні значення енергії дефектів пакування для легких лантанодів (La, Ce, Pr, Nd) порівняно з усіма іншими ГЦК-металами. В результаті насичення решітки  $\gamma$ -Pr дефектами пакування до деякої критичної концентрації  $c_k$  та їх упорядкованого розташування, яке супроводжується зниженням вільної енергії металу, виникає новий тип кристалічної решітки, притаманний  $\mu$ -модифікації празеодиму. У межах цього припущення розраховували дифракційні картини гексагональних компактних структур з різною кількістю N та закономірністю чергування щільноупакованих площин. Показано, що найкраща кореляція результатів розрахунків з експериментальними даними досягається для моделі семишарової гексагональної решітки (7R) з чергуванням атомних шарів ABCABAC... та періодами:  $a_{\mu-Pr} = 0,3642$  нм,  $c_{\mu-Pr} = 2,0811$  нм.

На завершення відзначимо, що перетворення кристалічних решіток ГЦК  $\rightarrow$  7R здійснюється при концентрації дефектів пакування  $c_k = 1/7$ , у той час як перетворення базової ГЦК  $\gamma$ -модифікації у рівноважний політип ( $\alpha$ -Pr) з ПГК-решіткою потребує більш високих значень  $c_k = 1/4$ . Ця обставина, очевидно, є основною причиною утворення метастабільної  $\mu$ -модифікації празеодиму при гартуванні з рідкого стану.

Робота виконана під керівництвом професора Олександра Лисенка.



## PREDICTION ABOUT OBTAINING SOLID SOLUTIONS BASED ON THE STATISTICAL GENERALIZED MOMENT

**A.Sh.Razzokov**

Urgench State University, Urgench, 14 Kh.Alimjan str., Uzbekistan.

e-mail: [a.razzokov777@gmail.com](mailto:a.razzokov777@gmail.com)

In this work, predictions are made for the formation of new semiconductor solid solutions using the rule of "statistical generalized moment" based on the Thomas-Fermi formula [1]:

$$m^* = \frac{eZ}{r} \cdot \Phi \left( \frac{rZ^{\frac{1}{3}}}{0.8853 \frac{\hbar^2}{\mu e^2}} \right)$$

where  $e$ ,  $\mu$  are the charge and mass of the electron,  $Z$  and  $r$  are the serial number and radius of the atom, respectively,  $\hbar$ - Planck's constant.

Table 1

	$Z$	$r \cdot 10^{-10}$ m	$\Phi$	$m^* \cdot 10^{-9}$ C/m
Si	14	1.11	0.64	12.9
P	15	0.98	0.75	18.4
S	16	0.87	0.0875	2.58
Zn	30	1.42	0.0272	0.921
Ga	31	1.36	0.0289	1.06
Ge	32	1.25	0.0327	1.34
As	33	1.14	0.0375	1,74
Se	34	1.03	0.0448	2.37
Cd	48	1.61	0.0161	0.769
In	49	1.56	0.0167	0.84
Sn	50	1.45	0.0189	1.04
Sb	51	1.33	0.0223	1.37
Te	52	1.23	0.0255	1.73
Pb	82	1.54	0.0121	1.03
Bi	83	1.43	0.0139	1.29

It can be seen from Table 1 that the closer the generalized moments of the components, the greater the probability of the formation of complex solid solutions. On this basis, we obtained solid solutions  $(Ge_2)_{1-x}(ZnSe)_x$ ,  $(GaAs)_{1-x}(ZnSe)_x$ ,  $(Ge_2)_{1-x-y}(GaAs)_x(ZnSe)_y$ ,  $(Sn_2)_{1-x-y}(GaAs)_x(ZnSe)_y$ ,  $Ge_{1-x}Sn_x$ ,  $Si_{1-x-y}Ge_xSn_y$ ,  $(Si_2)_{1-x}(GaP)_x$  [2].

[1] A.S.Davydov. "Quantum mechanics". Moscow 1963.

[2] Saidov A.S.,Saparov D.V, Usmonov,Sh.N.,Razzakov, A. Sh.,Kalanov M. Features of liquid-phase epitaxy of new solid solutions of  $(GaAs)_{1-y-z}(Ge_2)_y (ZnSe)_z$  and their photoelectric properties **International Journal of Modern Physics B**,V.37, Issue 1410, 2023, №2350132





**СЕКЦІЯ F**

***АСТРОФІЗИКА ТА АСТРОНОМІЯ***

**SECTION F**

***ASTROPHYSICS AND ASTRONOMY***



# ДОСЛІДЖЕННЯ ФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТА ХІМІЧНОГО ВМІСТУ ВОЛОКОН КРАБОВИДНОЇ ТУМАННОСТІ ЗА ДОПОМОГОЮ ПРОГРАМИ DIAGN

**Улеєв Андрій, Гаврилова Наталія**

Кафедра астрофізики Львівського національного університету імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 8, м. Львів, 79005, Україна,  
nvgavrylova@gmail.com

Дана робота присвячена проблемі дослідження хімічного вмісту волокон Крабовидної туманності. Вивчення наднових є одним із важливих питань в астрофізиці, що пов'язує такі області дослідження як внутрішня будова і еволюція зір, фізика і хімія міжзоряного середовища та зореутворення.

Для дослідження було використано спектри, отримані з різних областей Крабовидної туманності [1]. Спектри містять дозволені (рекомбінаційні) лінії Н і He та заборонені лінії N, O, Ne, S, Ar, аналіз інтенсивностей яких дає змогу визначати параметри, що характеризують фізичні умови в об'єкті.

Розрахунки були проведені з використанням програми DIAGN [2], яка дозволяє визначати електронні температури  $T_e$  і концентрації  $n_e$  методом перетину кривих  $n_e - T_e$ , отриманих для різних відношень інтенсивностей заборонених ліній одного й того ж іона, з подальшим визначенням іонного та хімічного вмістів.

Знайдено електронні концентрації  $n_e$ , температури  $T_e$ , іонні вмісти, а також хімічний склад волокон Крабовидної туманності, що визначався за допомогою іонізаційно-корекційних множників, знайдених з фотоіонізаційних моделей світіння газових туманностей з врахуванням неоднорідностей густини газу у волокнах [3].

Проведено попередній аналіз просторового розподілу хімічних елементів у волокнах Крабовидної туманності та підтверджено, що хімічний вміст волокон є різний.

[1] Fesen R.A., Kirshner R.P.: 1982, *Astrophys. J.*, 258, 1.

[2] Головатий В.В., Мелех Б.Я., Гаврилова Н.В. Фізика світіння газових туманностей, Львів (2013), 130 с.

[3] Holovaty V.V., Havrylova N.V.: 2005, *Astron. Zh.*, **82**, 5, 437.



## НОВІ АНАЛІТИЧНІ ПРЕДСТАВЛЕННЯ РОЗВ'ЯЗКІВ РІВНЯННЯ КЕПЛЕРА І ПРИКЛАДИ ЇХНЬОГО ЗАСТОСУВАННЯ

**Д. Дзіковський, М. Ваврух**

Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Кирила і  
Мефодія, 8, 79005 Львів, Україна  
e-mail: [dmytro.dzikovskyi@gmail.com](mailto:dmytro.dzikovskyi@gmail.com)

Запропоновано прості швидкозбіжні алгоритми аналітичного розрахунку ексцентричної аномалії в широкій області зміни ексцентриситету ( $0 < e \leq 1$ ). Цей алгоритм можна назвати перенормованою теорією збурень, нульове наближення якої є розв'язком нелінійного алгебраїчного рівняння. Це приводить до суттєвого зменшення збурення і швидкої збіжності. Представлення рівняння Кеплера [1,2] і використання перенормованої теорії збурень дозволяє одержати розв'язки також у вигляді ланцюгових функціональних дробів скінченного порядку [3].

В якості ілюстрацій розраховано кінематичні характеристики комети Галлея як функції часу та виконано оцінку маси подвійної системи галактик (Галактика + NGC 224) на основі моделі з еліптичним відносним рухом в області  $0.6 < e \leq 1$  [4].

[1.] C. E. Siewert, E. E. Burniston, *Celestial Mechanics* 6, 294 (1972).

[2.] O. H. E. Philcox, J. Goodman, Z. Slepian, *MNRAS* 506, 6111 (2021).

[3.] L. Lorentzen, H. Waadeland, "Continued Fractions", Atlantis Press Paris (2008).

[4.] Yu. Kudrya, I. Vavilova, *Extragalactic Astronomy*, Book 1, Naukova Dumka (2016).



## МОДИФІКОВАНА НЬЮТОНІВСЬКА ДИНАМІКА І ТЕМНА МАТЕРІЯ

**Кигим Владислав**

Львівський національний університет імені Івана Франка, кафедра  
теоретичної фізики імені Івана Вакарчука, [vladyslav.kyhym@lnu.edu.ua](mailto:vladyslav.kyhym@lnu.edu.ua)

Модифікована Ньютонівська динаміка (МОНД) [1] - це гіпотеза, що пояснює зміни в законах Ньютона для тіл, що обертаються на відстанях таких, що прискорення їх руху  $a_0 \sim 10^{-10} \frac{m}{c^2}$ . В першу чергу гіпотеза була запропонована М.Мілгромом для пояснення поведінки руху космічних об'єктів (зірок або скупчення зірок) навколо центра Галактики на великих відстанях від самого центру. В такому випадку прискорення спричинене силою матиме наступний вигляд:

$$\frac{F}{a} = m * \mu \left( \frac{a}{a_0} \right) \quad (1)$$

де  $\mu \left( \frac{a}{a_0} \right)$  апроксимуючий множник, який наближається до одиниці при великих  $\frac{a}{a_0}$  таким чином не порушуючи закони класичної динаміки адже на масштабах планет  $a \gg a_0$ . Надалі було зведено закони модифікованої динаміки та звичайної в результаті чого отримано видозмінений потенціал, явний вигляд якого залежить від апроксимаційної функції  $\mu$ .

$$V(r) = \frac{m * a_0^n * r^{2n-1}}{(2n-1) * n * G^{n-1} * M^{n-1}} \quad (2)$$

Потенціал збурення [2] добре описує поведінку на великих відстанях, порядку розмірів Галактик, проте є чутливим до відстаней порядку відстаней від планет до Сонця і сильно залежить від того, яку апроксимацію ми задаємо.

[1] Milgrom, M., A modification of the Newtonian dynamics as a possible alternative to the hidden mass hypothesis, *Astrophysical Journal*. **270** (1983), p. 365–370.

[2] O. I. Chashchina, Z. K. Silagadze, Remark on orbital precession due to central-force perturbations. (2008), p.1-3.



# RECALCULATION OF THE CHEMICAL COMPOSITION OF PNE AND THE RADIAL O/H ABUNDANCE GRADIENT IN THE MILKY WAY BY OPTIMIZATION PROCESSING.

**Myroslav Kasheba, Bohdan Melekh**

Department of Astrophysics, Ivan Franko National University of Lviv,  
8, Kyryla & Mephodia Str., Lviv, 79005

[liceistdominator@gmail.com](mailto:liceistdominator@gmail.com)

We represent the radial O/H abundance gradient for the Milky Way Galaxy obtained on the base of chemical compositions of planetary nebulae (PNe). Basic abundances were calculated using emission line spectra of galactic PNe. After that optimization routine updated abundances and distances to PNe. Emission line spectra of real PNe envelopes were taken from Karen Kwitter [1] and we used distances to them from GAIA DR2 [2]. The nebular diagnostic of these spectra were performed using PyNeb code [3]. To take into account the unobservable ionization stages the ionization-correction factors (ICFs) obtained ourselves from the grid of our photoionization models of the PNe envelopes were used. These models were calculated along the evolutionary tracks of PNe nuclei for two types of dust grains (carbonates and silicates) and various masses of progenitor stars using Gary Ferland's code Cloudy 17.01 [4]. We applied three different types of density distribution (Golovaty-Mal'kov semi-empirical law [5], hydrodynamical and homogeneous). The optimization routine for Gary's Ferland code Cloudy 17.01 was modified by us with purpose to specify the distances to the PNe of the Galaxy with larger precision than it was done by GAIA. Optimization modelling is a theoretical way for PNe investigation, but it takes into account the observed characteristics, because main aim of this task is to find the optimal values for free input parameters of the photoionization model (including distance) which satisfied the best reproducing of the observed emission line spectrum of real PN, as well as its angular radius.

- [1] R.B.C. Henry, K.B. Kwitter, A.E. Jaskot, B. Balick, M.A. Morrison, J.B. Milingo, 2010, *Ap.J.*, 724, 748.
- [2] S. Kimeswenger, D. Barria, *A.&A.* 616, L2(2018).
- [3] V. Luridiana, C. Morisset, R.A. Shaw, 2015, *A&A*, 573, A42.
- [4] G. J. Ferland, M. Chatzikos, F. Guzmán, M. L. Lykins, P. A. M. van Hoof, R. J. R. Williams, N. P. Abel, N. R. Badnell, F. P. Keenan, R. L. Porter, P. C. Stancil, arXiv:1705.10877v2, 2017.
- [5] V.V. Golovaty, Yu.F. Mal'kov, *Astron. Zh.* **69**, 1166-1178, 1992.



# ФОТОІОНІЗАЦІЙНИЙ АНАЛІЗ ХЕМОДИНАМІЧНИХ СИМУЛЯЦІЙ ЕВОЛЮЦІЙ КАРЛИКОВИХ ГАЛАКТИК З АКТИВНИМ ЗОРЕУТВОРЕННЯМ: ПОРІВНЯННЯ МОДЕЛЬНИХ СПЕКТРІВ З ДАНИМИ СПОСТЕРЕЖЕНЬ

**Михайло Шевченко, Богдан Мелех**

Кафедра Астрофізики,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

м. Львів, вул. Кирила і Мефодія, 8,

Mykhailo.Shevchenko@lnu.edu.ua

У процесі модифікації мультикомпонентних фотоіонізаційних моделей світіння небулярного середовища, що оточує область активного зореутворення, побудованих на результатах хемодинамічних симуляцій еволюції карликових галактик із активним зореутворенням (зміни вмісту хімічних елементів, концентрації та температури у зоні “супервітру” з часом життя галактики) виникає проблема, пов’язана із точністю відтворення інтенсивностей спектральних ліній низьких стадій іонізацій.

Це пов’язано із тим, що у вищевказаних фотоіонізаційних моделях розподіл елементів із високим рівнем збудження є рівномірним, що суперечить даним реальних спостережень (хімічні елементи низького збудження знаходяться на периферії галактики так, як центральні сектори зазнають вищих стадій іонізацій завдяки близького розташування до області зореутворення, яка, у свою чергу, є джерелом високоенергетичних фотонів).

Для вирішення даної проблеми на основі робіт [1] (у даній роботі брався до уваги лиш вік – 140 Myr) та [2] було розглянуто поділ спостережуваної проекції галактики на квадранти, потім на сектори (перший розташований на галактичній площині, двадцятий – на її осі симетрії), і, зрештою, на радіальні компоненти секторів (200 компонент із радіальною протяжністю кожного – 11,5 Па), а також введення у структуру моделі карликової галактики тонкого шару великої густини (ТШВГ) на межі каверни супервітру і гребеня ударної хвилі супервітру, який виконував би роль енергетичного бар’єра для іонізаційного випромінювання областей активного зореутворення. Згодом виконувався алгоритм дій у такій послідовності:

1. Для першого сектора з часового проміжку 10 Myr – 200 Myr було вибрано концентрацію та товщину тонкого шару великої густини на його максимумі (форма ТШВГ вибрана у вигляді трапеції), для яких задовольнялася умова входження інтенсивностей вибраних ліній у спостережувані проміжки;
2. Для першого сектора знаходимо відношення знайденої густини ТШВГ до загальної густини середовища, встановлюємо його значення для решти секторів;
3. За допомогою інтегрування по апертурам об’ємних мап емісійності (використовуючи 3D-код DiffRaY), знаходимо синтетичні спектри, які, згодом, порівнювалися із спостережуваними, взятими з роботи [3].

[1] V. Melekh, S. Recchi, G. Hensler and O. Buhajenko, Photoionization analysis of chemodynamical dwarf galaxies simulations, MNRAS 450, 111–127 (2015)

[2] V. Melekh, S. Recchi, G. Hensler and O. Buhajenko, Erratum: Photoionization analysis of chemodynamical dwarf galaxies simulation, MNRAS 502, 1048–1050 (2021)

[3] Kehrig C., Telles E., Cuisinier F., 2004, AJ, 128, 1141



## **ПЕРЕВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ ПЕРВИННОГО ГЕЛІУ ЗА ДОПОМОГОЮ МОДЕЛЮВАННЯ СВІТІННЯ НИЗЬКОМЕТАЛІЧНИХ ЗОН Н ІІ НАВКОЛО ОБЛАСТЕЙ НЕПЕРЕРВНОГО ЗОРЕУТВОРЕННЯ.**

**Ігор Кошмак**

Кафедра астрофізики, Львівський національний університет імені Івана  
Франка, Львів, вул. Кирила і Мефодія, 8, [igor.koshmak@lnu.edu.ua](mailto:igor.koshmak@lnu.edu.ua)

За допомогою мультикомпонентного фотоіонізаційного моделювання низькометалічних зон Н ІІ навколо областей неперервного зореутворення були отримані, зокрема, синтетичні потоки сильних заборонених ліній та іонний вміст хімічних елементів. Проведено селекцію кращих моделей, чиї відносні інтенсивності найкраще відтворюють відповідні спостережні відносні інтенсивності. Іонний вміст хімічних елементів, отриманий у відселектованих моделях, був використаний для отримання іонізаційно-корекційних множників (ІКМ). За допомогою ІКМ визначено відносний хімічний вміст елементів та перевизначено вміст первинного гелію та темп його збагачення протягом зоряної хімічної еволюції речовини, як це було зроблено для низькометалічних зон Н ІІ навколо областей спалахового зореутворення [1].

[1] I. O. Koshmak, V. Ya. Melekh, *Advances in Astronomy and Space Physics*, **8**, 16 (2018).





## КОРЕКТНІСТЬ ЗАСТОСУВАННЯ ПРОГРАМИ CLOUDY ДЛЯ СИМУЛЯЦІЇ ЕВОЛЮЦІЇ ВМІСТУ ПЕРШИХ МОЛЕКУЛ У ВСЕСВІТІ

**О. Добра, Б. Мелех.**

Львівський Національний університет імені Івана Франка  
кафедра астрофізики вул. Кирила і Мефодія, 8, 79000, Львів, Україна  
e-mail: [bmelekh@gmail.com](mailto:bmelekh@gmail.com)

Зроблено короткий огляд проблеми дослідження еволюції іонного та молекулярного вмісту Всесвіту в епоху Темних Віків та Космічного Світанку. Програма Г. Ферланда CLOUDY розроблена для моделювання світіння різноманітних небулярних середовищ. Вона має шикороку популярність серед астрофізиків через відкритість коду та постійний моніторинг її надійності не лише розробниками, але й користувачами, а також через постійне оновлення молекулярних даних. У документації цієї програми відзначено можливість застосування цієї програми і для космологічних симуляцій, зокрема для нестационарних моделей всесвіту. Ми вирішили здійснити перевірку коректності застосування програми CLOUDY (версій 17.02 та 22.01) у космологічних задачах, які передбачають симуляцію еволюції іонного та молекулярного вмісту у Всесвіті у вищезгадані епохи через порівняння її результатів з даними, отриманими програмою Б.Новосядлого. Детально проаналізувавши результати виявлено аномальну поведінку еволюції іонів  $H^+$  та  $D^+$  у результатах CLOUDY та проаналізовано її вплив на еволюцію перших молекул у Всесвіті. Зроблено висновок про необхідність модифікації "комологічної" частини коду CLOUDY з метою забезпечення коректності її роботи.



**СЕКЦІЯ G**

***КОМП'ЮТЕРНА ЕЛЕКТРОНІКА ТА ВБУДОВАНІ СИСТЕМИ***

**SECTION G**

***COMPUTER ELECTRONICS AND EMBEDDED SYSTEMS***



## ІНТЕЛЕКТУАЛЬНИЙ КАРДІОГРАФ ІЗ БАГАТОСТАДІЙНОЮ ДІАГНОСТИКОЮ

**Володимир Бойко, Любомир Монастирський**

Львівський національний університет імені Івана Франка, факультет  
електроніки та комп'ютерних технологій  
volodymyr.boiko.fe@lnu.edu.ua

Створено прототип двостадійної діагностичної системи для визначення патологій серця людини. Основою створення моделей машинного навчання були набори електрокардіограм РТВ і РТВ-XL, які зібрані у Fraunhofer Heinrich Hertz Institute, Berlin [1-3]. Файли форми сигналу були перетворені з оригінального пропрієтарного формату в бінарний формат з 16-бітною точністю з роздільною здатністю 1 мкВ/LSB. Сигнали пройшли незначну обробку, щоб усунути стрибки напруги від процесів увімкнення та вимкнення пристроїв, які були виявлені на початку та в кінці деяких записів, роздільність була підвищена до 500 Гц шляхом повторної дискретизації. Перший етап діагностики здійснюється на мікроконтролері у процесі вимірювання з використанням компактною попередньо натренованої згорткової нейромережі. Його результатом є визначення ймовірного відхилення від норми та його належності до одного з п'яти класів діагнозів. Результат цього етапу відображається візуально на LCD-дисплеї. На другому етапі виміряний цифровий сигнал передається на сервер для підтвердження висновку і виявлення його приналежності до одного із 24 підкласів патологій.

Пристрій спроектовано на основі мікроконтролера STM32F407VGT6 і аналогової вимірювальної плати AD8232 з вбудованим смуговим фільтром, проте експерименти показали необхідність додаткового застосування цифрового фільтра Баттерворта зі смугою пропускання 3—35 Гц. Проаналізовано всі особливості отриманого прототипу. Основними перевагами системи є одночасно оперативність діагностики (попередній діагноз ставиться під час обстеження) та надійність результатів завдяки використанню складнішої нейромережі на сервері чи в спеціалізованому центрі опрацювання даних. Система придатна до вдосконалення шляхом дотренування обох нейромереж на нових наборах даних, оптимізації структури та залучення різних типів нейромереж і збільшення кількості стадій діагностики. Хоча машинне навчання вже широко використовується в медичній практиці, і, зокрема, в кардіографії, проте реалізований підхід ще не описаний у доступній науково-технічній літературі, що свідчить про його оригінальність.

- [1] PTB Diagnostic ECG Database [Electronic resource]. – 2020. – [Cited 2023, 5 May.]. – Available from : <https://www.physionet.org/content/ptbdb/1.0.0/>
- [2] PTB-XL, a large publicly available electrocardiography dataset [Electronic resource]. – 2020. – [Cited 2023, 5 May.]. – Available from : <https://physionet.org/content/ptb-xl/1.0.1/>
- [3] Wagner, P., Strodthoff, N., Bousseljot, RD. et al. PTB-XL, a large publicly available electrocardiography dataset. *Sci Data* Vol 7, No. 154 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41597-020-0495-6>



## РОЗРОБКА МОДУЛЬНОГО ВИМІРЮВАЛЬНОГО БЛОКУ ВАКУУМНОГО ПЕРЕТВОРЮВАЧА ПМТ-2

**Danylo Maksymchuk<sup>1</sup>, Mykhailo Ksonzhyk<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Ivan Franko National University of Lviv, Universytetska Str., 1,  
Danylo.Maksymchuk.AFELK@lnu.edu.ua

<sup>2</sup>Ivan Franko National University of Lviv, Universytetska Str., 1,  
mykhailo.ksonzhyk@lnu.edu.ua

Для вимірювання низьких тисків на ділянці середнього та високого вакууму використовують різного типу теплові та іонізаційні манометри. Найбільш поширеними на території України є давачі ПМТ-2 та ПМИ-2, які під'єднуються за допомогою кабелів до вимірних блоків вакууметрів. Таке рішення є виправданим у випадку використання у обмеженого числа давачів. По мірі ускладнення вакуумної системи виникає потреба одночасно вимірювати тиск на різних ділянках системи, керувати її роботою в межах єдиної системи автоматизації. Тому авторами прийнято рішення розробити прототип вакуумметра для давача ПМТ-2 у вигляді компактного модуля з використанням вбудованих рішень в рамках концепції ІОТ. Перевагою такого підходу є порівняно низька вартість модуля, простота виготовлення та можливість масштабування рішення у складних вакуумних системах і дистанційний контроль за їх роботою.

Давач ПМТ-2 – термопарний манометр, що відноситься до теплових манометрів і його робота базується на залежності теплопровідності газу від тиску. В режимі постійного струму термопарою реєструють перегрів нитки розжарення по мірі зменшення тиску у балоні давача. В цілому прототип складається з блоків: стабілізації струму, реєстрації ЕРС, керування, виведення та збереження інформації і блоку живлення. Керує роботою приладу контролер ESP32.

В якості системи вимірювання ЕРС термопари давача ПМТ-2 використано модуль MAX6675. Для підключення модуля MAX6675 до мікроконтролеру використовується інтерфейс SPI. Перевагою даного модуля є висока точність (12 біт АЦП) та наявність блоку термостабілізації холодних кінців термопари. Для коректної роботи давача потрібно забезпечити стабілізацію струму який протікає через нитку розжарення. Типові значення змінюються в межах від 100 – 150 мА, і залежать від умов виготовлення конкретного давача. Значення струму стабілізації визначається під час калібрування давача, виходячи з того, що струм розжарення повинен забезпечувати значення ЕРС термопари 10 мВ, у випадку коли давач під'єднаний до робочої камери, де тиск газів є менший за  $10^{-4}$  мм. рт. ст.

Виведення даних та керування пристроєм здійснюється через веб інтерфейс а сам мікроконтролер під'єднується до мережі через WI-FI в режимі клієнта або може бути налаштований в режим AP (точка доступу), також планується реалізувати виведення даних та керування через Modbus, та додатково встановити малий OLED екран 128\*64.



## ВИКОРИСТАННЯ ПРОТОКОЛУ MQTT ДЛЯ ОПИТУВАННЯ СЕНСОРНИХ МЕРЕЖ В СИСТЕМІ "РОЗУМНИЙ ДІМ"

**Тимофій Петруша, Тарас Ляшук**

Рівненський державний гуманітарний університет, м. Рівне, вул. Степана  
Бандери, 12, [petrusha\\_ak15@nuwm.edu.ua](mailto:petrusha_ak15@nuwm.edu.ua), [taras.liashuk@rshu.edu.ua](mailto:taras.liashuk@rshu.edu.ua)

MQTT (Message Queuing Telemetry Transport) - це легкий мережевий протокол обміну повідомленнями, спеціально розроблений для вбудованих систем з обмеженими ресурсами. Протокол базується на моделі publish/subscribe та передбачає наявність центрального брокера, що координує обмін повідомленнями між клієнтами [1].

Серед основних переваг MQTT можна виділити наступні:

- маленький розмір повідомлень, що забезпечує економію пропускну здатності;
- відсутність необхідності утримувати постійні з'єднання між клієнтами, що зменшує навантаження на систему;
- підтримка QoS (Quality of Service) рівнів, що дозволяє гарантувати доставку повідомлень.

В свою чергу, до обмежень протоколу можна віднести:

- залежність від центрального брокера, що може стати вразливим місцем системи;
- відсутність підтримки прямого обміну повідомлень між клієнтами.

Приклади практичного застосування:

- система автоматичного поливу рослин, що використовує MQTT для передачі даних про вологість ґрунту та контролювання насосів;
- система контролю температури та вологості в приміщенні, де сенсори передають дані через MQTT на центральний контролер для регулювання опалення та вентиляції.

Застосування MQTT для опитування сенсорних мереж може спростити архітектуру системи "Розумний дім" та підвищити надійність. Зокрема, протокол може бути використаний для:

- збору даних від різних сенсорів (температура, вологість, освітлення тощо) та передачі їх на центральний контролер;
- контролю елементів системи "Розумний дім" (розетки, вимикачі, камери тощо) на основі аналізу даних від сенсорів;
- забезпечення безпеки системи через підтримку процедур шифрування та аутентифікації.

В результаті дослідження використання MQTT в системах "розумний дім" встановлено, що протокол є ефективним рішенням для опитування сенсорних мереж. Його переваги, такі як легкість, надійність та енергоефективність, дозволяють реалізувати стабільні та масштабовані системи. Однак, слід враховувати обмеження протоколу MQTT, пов'язані з використанням TCP/IP, при проектуванні систем, де це може бути проблематично.

[1] Gaston C. Hillar, MQTT Essentials – A Lightweight IoT Protocol, Packt Publishing (2017), p. 280.



## МОНІТОРИНГ ЯКОСТІ ПОВІТРЯ В СИСТЕМІ "РОЗУМНИЙ ДІМ" НА ОСНОВІ ДАНИХ СЕНСОРІВ ТА ПРОГНОЗІВ ПОГОДИ

**Тарас Ляшук, Тимофій Петруша**

Рівненський державний гуманітарний університет, м. Рівне, вул. Степана  
Бандери, 12, [taras.liashuk@rshu.edu.ua](mailto:taras.liashuk@rshu.edu.ua), [petrusha\\_ak15@nuwm.edu.ua](mailto:petrusha_ak15@nuwm.edu.ua)

Якість повітря в приміщенні має важливе значення для здоров'я та комфорту людей. Системи "розумного дому" можуть значно поліпшити якість повітря, використовуючи динамічне управління вентиляцією та очищенням повітря на основі даних сенсорів та прогнозів погоди.

Для реалізації контролю якості повітря використовуються різні сенсори, які вимірюють параметри повітря, такі як температура, вологість, рівень CO<sub>2</sub> та інші. Для підвищення точності системи, додатково використовуються дані прогнозів погоди. Розроблені алгоритми опрацьовують інформацію від сенсорів та прогнози погоди, для адаптивного контролю якості повітря [1].

Алгоритми динамічного управління якістю повітря мають на меті оптимізувати вентиляцію та очищення повітря з урахуванням даних сенсорів та прогнозів погоди. Ці алгоритми можуть включати правила на основі порогових значень, адаптивний контроль та методи оптимізації. Наприклад, якщо рівень CO<sub>2</sub> в приміщенні перевищує порогове значення, алгоритм може активувати систему вентиляції для подачі свіжого повітря. Якщо прогноз погоди передбачає підвищення вологості, алгоритм може активувати систему очищення повітря з відповідними фільтрами для уникнення підвищення рівня вологості в приміщенні.

Крім того, алгоритми моніторингу якості повітря можуть допомогти виявити проблеми з вентиляцією та очищенням повітря та вчасно їх виправити. Наприклад, якщо система вентиляції не працює належним чином, алгоритм може виявити збільшення рівня CO<sub>2</sub> та зробити відповідні корективи для вирішення проблеми.

Для забезпечення максимального комфорту та здоров'я мешканців, важливо оптимізувати систему вентиляції та очищення повітря в системі "Розумний дім". Одним із способів оптимізації є використання різних типів фільтрів для очищення повітря. Наприклад, фільтри з активованим вугіллям можуть ефективно видалити запахи та гази, тоді як HEPA-фільтри можуть усунути дрібні частки, такі як ПМ2.5 та ПМ10.

Також, оптимізація вентиляції може включати використання різних типів систем, таких як системи з повітряними заслінками, системи з міксерами повітря та системи з теплообмінниками. Ці системи можуть бути регульовані відповідно до потреб мешканців та даних сенсорів та прогнозів погоди, що дозволяє знизити витрати на електроенергію та підвищити ефективність системи.

В результаті дослідження, розроблено алгоритми для динамічного управління та моніторингу якості повітря в системі "Розумний дім", на основі даних сенсорів та прогнозів погоди. Застосування розроблених алгоритмів дозволяє підтримувати комфортні умови для мешканців, забезпечуючи оптимальні параметри повітря в приміщенні та енергоефективність.

[1] M. Buchanan, *The Smart Home Manual: Your Home to Keep Your Family Entertained, Comfortable, and Safe (Home Technology Manuals)* (2020), p. 136.





## USING KOTLIN MULTIPLATFORM TECHNOLOGY FOR CREATING CROSS-PLATFORM MOBILE APPLICATIONS

**Roman Korostenskyi, Igor Olenych**  
Ivan Franko Lviv National University  
50, Dragomanov str., 79005 Lviv, Ukraine,  
E-mail: romankorostensky@gmail.com

Mobile application development is a dynamic field of software engineering defined by the rapid progress of various mobile devices and operating systems (OS). To maximize the presence of a software product in the market, it is necessary to ensure that it can be used on as many mobile platforms as possible [1]. One possible approach to mobile application development is based on cross-platform solutions that adapt the software to multiple OS [2,3]. A multi-platform approach makes it possible to optimize software development processes on one code base and even one programming language and significantly increase their efficiency. As a result of compiling a cross-platform application, executable files for various OS can be obtained. Among the many frameworks for simplifying the development of cross-platform projects, the Kotlin Multiplatform is a promising technology [4]. The technology helps to save developers time and money while maintaining the flexibility and advantages of native programming.

The Android and iOS versions of three mobile applications with various structural and functional complexities have been implemented to study the effectiveness of using the beta ware of Kotlin Multiplatform Mobile (KMM) technology in the process of developing cross-platform applications. The main idea of the KMM technology is to bring business logic into a separate module, where it can work independently of platform implementations. In particular, business rules, working with the network and caching were transferred to the shared KMM module in the developed mobile applications. The main features of using the shared KMM module have been determined on the basis of the analysis of the code base volume and the build time of software components.

The formation of the shared KMM modules made it possible to reduce the total code base (the number of software code lines) of Android and iOS versions of mobile applications by approximately 19-28%, depending on their structural complexity. It has been established that the build time of developed mobile applications increased by 7–23% due to the use of shared KMM modules. In addition, the build time of the KMM modules on the iOS platform was longer than on the Android platform. However, no changes were found in the functionality, speed, stability, and reliability of the developed applications when using the shared KMM modules. Therefore, the Kotlin Multiplatform technology provides an increase in the efficiency of the process of developing cross-platform mobile applications.

[1] E.W.T. Ngai and A. Gunasekaran, *Decision Support Systems*, **43**, 3 (2007).

[2] S. Xanthopoulos and S. Xinogalos, 6th Balkan Conference in Informatics, (2013). DOI:10.1145/2490257.2490292.

[3] R. Jabangwe, H. Edison, and A.N. Duc, *Journal of Systems and Software*, **145**, 98 (2018).

[4] Kotlin Multiplatform. – 2023. – [Online]. Available: <https://kotlinlang.org/docs/multiplatform.html>





## ВИКОРИСТАННЯ ОДНОТИПНИХ ФІЛЬТРІВ У ВБУДОВАНИХ СИСТЕМАХ

**Т. Ситніков, І. Бадерко, П. Ступень, В. Ситніков**

Національний університет "Одеська політехніка

Україна, м. Одеса, 65044, пр. Шевченка, 1, tykhon.sytников@gmail.com

Відповідно до концепції Індустрія 4.0 вбудовані системи та їх апаратно-програмні компоненти повинні відповідати новим вимогам за мобільністю, гнучкістю, адаптивністю, пристосованістю до умов функціонування. Для досягнення цього системи оснащуються багатофункціональними датчиками та компонентами, які повинні перебудовувати власні характеристик і працювати у реальному часі. Нові вимоги відповідно до концепції Індустрія 5.0 поширюються в напрямку гуманізації прийняття рішення та дружнього контакту з людиною.

Обробка сигналів у вбудованих системах в основному включає різні частотно-залежні компоненти (ЧЗК), але частіше вони виконуються на основі компонентів низького порядку, оскільки це обумовлено малими витратами на обчислення коефіцієнтів передавальної функції, кількості їх коефіцієнтів, простотою налагодження або перебудови, помірним енергоспоживанням та часу обробки. Крім того, при роботі у реальному часі є обмеження на обчислення, перебудову та перехідний процес роботи нової конфігурації. Тому, в якості компонент низького порядку частіше використовують компоненти першого та другого порядку. До основних операцій при перебудові ЧЗК відносять - зміну частоти зрізу або смуги пропускання компоненти, так і підвищення крутизни амплітудно-частотної характеристики (АЧХ).

При послідовному з'єднанні передавальних функцій однотипних компонент їх передавальні функції перемножується. Оскільки компоненти однотипні, то при послідовному з'єднанні однотипних компонент їх перемноження перетворюється у возведення у ступень та відповідно їх АЧХ теж возводиться у ступень.

Тому метою роботи є удосконалення підходу до розрахункових формул послідовного з'єднання однотипних ЧЗК для підвищення крутизни АЧХ. Розглянемо це на прикладі смугових цифрових фільтрів, оскільки вони мають широке застосування при обробці сигналів у вбудованих системах.

При послідовному з'єднанні однотипних смугових передавальних функцій їх основна АЧХ стискається, при цьому частоти зрізу зсуваються до центральної частоти, яка не зрушується, і зростає крутизна АЧХ.

При возведення у ступень рівень частот зрізу залишається попереднім, але тоді для визначення частот зрізу нових АЧХ необхідно добувати корінь відповідного порядку з цього рівня. Тоді, по АЧХ основного фільтра можна визначити частоти зрізу нової АЧХ на рівні добутого кореня з початкового рівня.

Для визначення частот зрізу нової АЧХ після з'єднання  $n$  однотипних фільтрів по основній АЧХ необхідно вирішити рівняння на основі АЧХ основного фільтра та невідомих частот зрізу для нового з'єднання.

Таким чином, при аналізі АЧХ послідовного з'єднання однотипних компонент одержано новий підхід для обчислення точних значень частот зрізу. Це дозволяє оперативного обчислити необхідне "стискання" АЧХ, а при обмежених обчисленнях можливо скористатися попередніми розрахунками у вигляді таблиць значень. Такий підхід дозволяє у автоматичному режимі підвищити захищеність обробки сигналів при наявності перешкод у вбудованих системах.

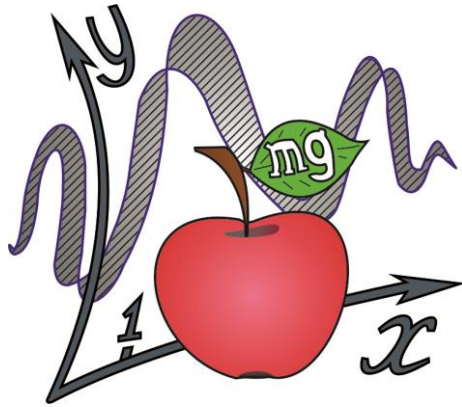


## ОПТИМІЗАЦІЯ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ FOG/EDGE-ОБЧИСЛЕНЬ

**Ігор Яковенко, Ярослав Бойко, Христина Марущак**  
Львівський національний університет імені Івана Франка,  
факультет електроніки та комп'ютерних технологій  
ihor.yakovenko@lnu.edu.ua

Реалізовано гібридну модель обчислень, у якій процес навчання згорткової мережі здійснювався на відносно потужному персональному комп'ютері, а відтак збережена структура моделі та вагові коефіцієнти переносилися на мікроконтролер. Як приклад згорткової нейромережі (CNN) із практичним змістом була відтворена система розпізнавання зображень відбитків пальців, описана в [1]. Для реалізації спеціалізованої CNN була використана бібліотека високого рівня Keras. Нейронна мережа складається з чотирьох згорткових шарів, які мають відповідні лінійні ректифікації та операції об'єднання. Крім того, на виході мережі є два щільних (повністю пов'язаних) шари для бінарної класифікації. Для підвищення точності навчання нейронної мережі були застосовані методи класу ImageDataGenerator, що реалізують розширення множини даних: вибірка стандартизація, стандартизація за ознаками, випадкове обертання, зсуви і перевороти, переупорядкування розмірів. В якості вхідних даних для навчання нейронної мережі був використаний фрагмент бази даних біометричної інформації CASIA Fingerprint Image Database версії 5.0. Для отриманої таким способом моделі було проведено різні способи оптимізації з метою її розгортання на мікроконтролерній платі STM32H745I-DISCO. Вибір цього мікроконтролера зумовлений великим обсягом SRAM і FLASH-пам'яті та високопродуктивними CPU з апаратною підтримкою DSP, що потенційно дає змогу розміщувати в ньому відносно складні моделі. До моделі застосовувалися тільки посттренувальна оптимізація, а саме скорочення розрядності до 16 (float16) і 8 (int8) бітів. При цьому використовувалися два засоби — оптимізатор Tensorflow Lite і розширення конфігуратора STM32CubeMX — STM32Cube.AI. Найкращі результати з точки зору відхилень від точності оригінальної (неоптимізованої) моделі дають засоби пакету X-CUBE-AI. В офіційній документації до цього пакету методи оптимізації не вказані. Відомо лише, що пакет ґрунтується на TensorFlow Lite. Проте застосування TF Lite також дає задовільні результати з перевагами, притаманними програмним продуктам з відкритим кодом — доступність алгоритмів, можливість розширення функціональності та налаштувань під конкретну задачу. Отримані результати можна використовувати як керівництво у виборі методів оптимізації моделей машинного навчання у галузі Fog/Edge-обчислень. Крім цього, розроблена модель може стати прототипом пристрою для біометричної ідентифікації з можливістю вдосконалення базової моделі розпізнавання відбитків пальців чи аналогічних біометричних пристроїв на базі мікроконтролерів Arm Cortex M4/M7.

- [1] Liubomyr Monastyrskyi, Yaroslav Boyko, Volodymyr Lozynsky, Taras Kropyvka. Application of Convolutional Neural Networks in Biometric Identification Problems. <https://doi.org/10.30970/elit2018.A51>



**СЕКЦІЯ Н**

***МОДЕЛЮВАННЯ ЯВИЩ ТА ПРОЦЕСІВ***

**SECTION N**

***MODELING OF PHENOMENA AND PROCESSES***



# BIFURCATIONS IN THE COMPLEX LORENZ MODEL AND THEIR IMPACT ON THE DYNAMICS OF TRAFFIC FLOWS

Oleksii Khomenko<sup>1,2</sup>, Oleksiy Shikura<sup>1</sup>, Kateryna Khomenko<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Sumy State University, Sumy, 40007, Mykola Sumtsov Street, 2, Ukraine

<sup>2</sup>Peter Grünberg Institut-1, Forschungszentrum-Jülich, Jülich, D-52425, Germany [o.khomenko@mss.sumdu.edu.ua](mailto:o.khomenko@mss.sumdu.edu.ua), [aleksejsikura@gmail.com](mailto:aleksejsikura@gmail.com)

The Lorenz equations were proposed in [1] to describe transport flows, and they have been studied for the past two decades [2–5]. Understanding chaotic behavior in nonlinear dynamic systems, like the real Lorenz model, requires bifurcation analysis. This study aims to investigate the stability of bifurcated solutions in the complex Lorenz model and also discusses some relevant results for the real Lorenz system.

Using Hopf bifurcation theory [6], a periodic bifurcation solution is found, with its stability determined by Floquet indicators. The study reveals that the bifurcation is subcritical, which confirms the idea of "sharp" conditions for chaos emergence in the real Lorenz model. Additionally, the paper discusses physical problems that lead to the complexity of the Lorenz equations, where some functions have complex values. It presents a transportation flow system as a complex Lorenz model, to study how frequency detuning affects the bifurcation of equilibrium and double-periodic Lorenz model.

The study's main result is that changes in frequency detuning can affect the type of bifurcation and stability of the system's solutions. For instance, at certain values of frequency detuning, a double-periodic solution may disappear, and the type of bifurcation may change from subcritical to supercritical or vice versa. Thus, studying the complex Lorenz model can help understand how various physical factors affect transport flow dynamics.

The study also highlights the importance of Hopf bifurcation theory, which is a crucial tool for studying the dynamics of nonlinear systems. Its application allowed for a detailed analysis of the stability of bifurcated solutions of the complex Lorenz model. The results of this study may have important implications for the design and management of transportation systems.

[1] A.I. Olemskoi, A.V. Khomenko, *Phys. Rev. E*, **63**, 036116–(1–4) (2001).

[2] Hartono, F.Y. Saptaningtyas, K.P. Krisnawan, *J. Phys. Conf. Ser.*, **983**, 012092 (2018).

[3] S.B. Coskun, M.T. Atay, E. Senturk, *Math. Comput. Simulat.*, **166**, 481 (2019).

[4] Q. Yang, Z. Shi, S. Yu, J. Zhou, *Transp. Res. B*, **111**, 266 (2018).

[5] S. Yu, X. Zhao, Z. Xu, Z. Shi, *Physica A*, **461**, 446 (2016).

[6] J.E. Marsden, M. McCracken, *The Hopf bifurcation and its applications* (New-York: Springer: 1976).



## РОЗВ'ЯЗАННЯ РІВНЯНЬ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ДИНАМІЧНИХ СИСТЕМ МЕТОДОМ ДОРНМАНА-ПРИНСА ЗІ ЗМІННИМ КРОКОМ ІНТЕГРУВАННЯ

**Микола Ангелов, Іван Хвищун**

Львівський національний університет імені Івана Франка, факультет електроніки, м. Львів, вул. Тарнавського, 107, nikovolt220@gmail.com

Математичне моделювання динамічних систем є однією із важливих і складних проектних операцій, оскільки воно розв'язує задачу дослідження часової поведінки досліджуваної системи на основі певних знань про його початковий стан і прогнозовану внутрішню структуру, яка задається математичною моделлю (ММ).

Найчастіше ММ динамічної системи є система звичайних диференціальних рівнянь у нормальній формі Коші, або у неявній формі [1]. Задача Коші полягає у знаходженні розв'язку системи рівнянь ММ на інтервалі  $[t_0, t_k]$ , з початковою умовою  $x(t_0) = x_0$ :

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = f(x(t), t) \quad , \quad x(t_0) = x_0, \quad [t_0, t_k]. \quad (1)$$

Чисельний розв'язок задачі Коші полягає у заміні задачі (1) її дискретним (різницевим) аналогом:

$$x_{m+1} = x_m + \varphi(h_{m+1}, h_m, \dots, h_{m-k}, x_{m+1}, x_m, \dots, x_{m-k}, \dot{x}_{m-k}, x_{m+1}, x_m, \dots, x_{m-k}) \quad (2)$$

Тут  $h_{m+1} = t_{m+1} - t_m$  – крок інтегрування.

Для досягнення оптимального співвідношення між затраченим процесорним часом та точністю вихідних результатів використовують автоматичний вибір кроку.

У доповіді зроблено порівняння ефективності трьох алгоритмів вибору кроку інтегрування, а саме алгоритмів Брайтона, Фельберга та методу «трьох зон».

Для тестування ефективності цих алгоритмів, розроблено інтегратор, на основі методу Дорнмана-Принса п'ятого порядку точності з автоматичним вибором кроку інтегрування, що належить до сімейства методів Рунге-Кутта. В минулому цей метод використовувався при вирішенні задач, які пов'язані з розрахунком еліптичних орбіт супутників [2].

Оскільки вказані алгоритми демонструють різні результати, в залежності від обраної тестової задачі, детальні параметри їхнього налаштування та можливість швидкої зміни алгоритму були важливим акцентом при дослідженні.

Найбільш універсальним, з реалізованих нами алгоритмів, виявився «метод трьох зон», в якому наступний крок визначається за формулою [3]:

$$h_{m+1} = \begin{cases} h_m / 2, & \text{якщо } |e_m| > \varepsilon; \\ h_m, & \text{якщо } \left[ \varepsilon / k^2 \right] < |e_m| < \varepsilon; \\ kh_m, & \text{якщо } |e_m| < \left[ \varepsilon / k^2 \right], \end{cases} \quad (3)$$

де  $k$  – порядок точності методу інтегрування,  $e$  – похибка на кроці,  $\varepsilon$  – максимальна похибка.

[1] І.О. Хвищун, Програмування і математичне моделювання: Підручн., Ін Юре, Київ (2007), с. 544.

[2] V. Thomee, in: Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems, Berlin, 1997.

[3] E. Hairer, S. P. Norsett G. Wanner, in: Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems, 1999.





**СЕКЦІЯ I**

***СИСТЕМИ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ТА АНАЛІЗ ДАНИХ***

**SECTION I**

***ARTIFICIAL INTELLIGENCE SYSTEMS AND DATA ANALYSIS***





## АНАЛІЗ LArTPC ДАНИХ З ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДІВ МАШИННОГО НАВЧАННЯ

**Фалько Андрій, Руслан Єрмоленко, Ольга Гогота**

Київський національний університет імені Т. Шевченка, фізичний  
факультет, вул. Академіка Глушкова, 4,  
[andrey2000fal@gmail.com](mailto:andrey2000fal@gmail.com), [ruslan.yermolenko@gmail.com](mailto:ruslan.yermolenko@gmail.com),  
[gogota.olga@gmail.com](mailto:gogota.olga@gmail.com)

Згорткові нейронні мережі (в англ. Convolution Neural Networks) продемонстрували високу ефективність в галузі комп'ютерного зору. В фізиці високих енергій вони знайшли своє застосування для експериментів з осциляції нейтрино [1], зокрема для обладнаних часо-проекційними камерами на зрідженому аргоні (Liquide Argon Time Projection Chambers). LArTPC – тип трекових детекторів, який дозволяє отримувати високо роздільні двовимірні або тривимірні зображення (до кількох мм/піксель) траєкторій заряджених частинок, що потрапили у об'єм детектора, або утворилися всередині в наслідок взаємодії.

Оскільки нейтрино є найбільш легко проникаючими частинками у Стандартній моделі, то для їх реєстрації необхідні детектори великих об'ємів. Наприклад, експерименти MicroBooNE [2] та DUNE [3] в активному об'ємі мають 90 та відповідно 40000 тон зрідженого аргону. Тому зображення LArTPC є  $10^6 \pm 10^9$ - піксельними, але водночас розрідженими, оскільки майже весь піксельний простір зображень, за винятком тонких траєкторій частинок, заповнений нульовими значеннями.

Для обробки багато-вимірних розріджених даних були запропоновані Submanifold Sparse Convolutional Networks (SSCN) [4] та Sparse Tensor Networks [5].

Автори роботи [6] використали SSCN для 2D та 3D семантичної сегментації змодельованих даних PILArNET [7] з допомогою архітектури sparse U-ResNet. Точність ідентифікації одного з класів - michel електронів, була нижчою ніж інших 4 класів. У роботі [8] в ході реконструювання нейтрино взаємодії також використовується sparse U-ResNet.

В даній роботі була реалізована задача семантичної сегментації даних PILArNET з використанням Sparse Tensors [5] та протестовані різні модифікації попередньої архітектури: Attention [9] U-ResNet, U-Net3+ [10], U-ResNet із додатковим deep supervision [10] блоком, а також функцій втрат: focal loss, weighted cross-entropy з метою підвищення точності ідентифікації michel електронів. Найкращі результати були отримані для weighted cross-entropy. Подальше покращення можливе завдяки комбінуванню декількох методів.

[1] C. Adams et al. (MicroBooNE Collaboration), Phys. Rev. D 99, 092001 (2019).

[2] R. Acciarri et al. (MicroBooNE Collaboration), J. Instrum. 12, P02017 (2017).

[3] R. Acciarri et al. (DUNE Collaboration), arXiv:1601.02984.

[4] B. Graham and L. van der Maaten, arXiv:1706.01307.

[5] Chapter 4, Christopher B. Choy. High Dimensional Convolutional Neural Networks for 3D Perception. Thesis Ph.D. Stanford University 2020

[6] L. Domin' e and K. Terao (DeepLearnPhysics Collaboration), Phys. Rev. D 102, 012005 (2020).

[7] C. Adams, K. Terao, and T. Wongjirad, arXiv:2006.01993.

[8] F. Drielsma, K. Terao, L. Domin' e, and D. H. Koh, arXiv:2102.01033.

[9] Ozan Oktay, Attention U-Net: Learning Where to Look for the Pancreas. arXiv:1804.03999.

[10] Huimin Huang, arXiv:2004.08790



## AGGRESSION DETECTION OF TEXT USING MACHINE LEARNING ALGORITHMS

**Marianna Prytula, Oleh Sinkevych, Igor Olenych**

Ivan Franko Lviv National University  
50, Dragomanov str., 79005 Lviv, Ukraine,  
mariannaprytula@gmail.com, oleh.sinkevych@lnu.edu.ua

People spend a lot of time communicating and interacting with people, most often using social networks. It is also difficult to imagine our life without monitoring the news, considering the Russian invasion of Ukraine and also constant changes in the whole world. It is undeniable cyber aggression has a negative effect, such as harming, threatening or harassing of person. With increasing volumes of news, messages and tweets, there is a demand for an optimal model of aggression detection in textual data to alleviate its impact on people's lives.

Supervised machine learning algorithms are widely used for cyberbullying and aggression prediction [1], [2].

The dataset with news related to the Russo-Ukrainian war used in the development process was obtained in cooperation with the journalism faculty of Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine and consisted of thousands of samples in the Ukrainian language. The data was divided into two labeled classes: aggressive and non-aggressive.

Several supervised classifiers and deep learning architecture were applied in our work for comparing and selecting the optimal machine learning algorithm.

The next stages were conducted to create aggression detection models:

1. Data pre-processing (tokenization, stemming, lemmatization, stop words elimination).
2. Text vectorization (TF-IDF).
3. Naive Bayes, K-Nearest Neighbors, Support Vector Machines (SVM), Random Forest Classifier, Logistic Regression classifiers and LSTM, Bidirectional LSTM approaches were used for model development.
4. Comparisons of models using Classification Reports and Confusion Matrices.

Due to the predominance of non-aggressive samples in the dataset, more errors were made for the prediction of aggressively labeled text. The overall accuracy was obtained in the range of 81-83% that indicates an effectiveness of the proposed models. Considering all obtained metrics (accuracy, precision, recall and f1-score), Bidirectional LSTM Model showed better results compared to others.

[1] Al-Garadi, Mohammed Ali et al. "Predicting Cyberbullying on Social Media in the Big Data Era Using Machine Learning Algorithms: Review of Literature and Open Challenges." *IEEE Access* 7 (2019): 70701–70718.

[2] N. S. Mullah and W. M. N. W. Zainon, "Advances in Machine Learning Algorithms for Hate Speech Detection in Social Media: A Review," in *IEEE Access*, vol. 9, pp. 88364-88376, 2021, doi: 10.1109/ACCESS.2021.3089515.



# USING NEURAL NETWORK VARIATIONAL MONTECARLO FOR GROUND STATE ENERGY PREDICTION

**Mykhailo Moroz, Oleg Bovgyra**

Ivan Franko National University of Lviv

e-mail: michael08840884@gmail.com

In this study, we present a novel approach to optimize the ground state energy of quantum systems using variational Monte Carlo (VMC) simulations with a neural network Slater-Jastrow wavefunction ansatz. To address the challenges of solving the multi-electron Schrodinger equation, we employ a combination of machine learning and computational techniques, including the use of GPGPU for the calculations.

The energy of the quantum many-electron system is optimized by using Evolution Strategies with the weighted sum of the variance and energy of the system as the loss function. For the numerical implementation, the neural network architecture and optimization algorithm are thoroughly discussed. Initially implemented in PyTorch, we later rewrote the code using compute shaders for better performance and flexibility, moving away from backpropagation and employing alternative optimization techniques.

We encountered several challenges during the implementation, such as numerical instability, sampling issues, and difficulties in computing the gradient of the energy expectation. By utilizing compute shaders, we were able to more easily resolve these issues and improve the robustness and speed of the optimization.

The effectiveness of our approach is demonstrated through a series of benchmark problems in quantum mechanics, showcasing the potential of neural network wavefunctions to handle challenging quantum systems. For instance, in the case of lithium hydride, our method achieved an optimized energy of -8.032 Hartree, compared to the reference energy of -8.070548 Hartree, resulting in a total error of 0.47% and capturing 54% of the correlation energy. For methane, our method achieved an optimized energy of -40.3061 Hartree, compared to the reference energy of -40.514 Hartree and the Hartree-Fock (CBS) energy of -40.2171 Hartree. This resulted in a total error of 0.51% and captured 30% of the correlation energy.

Our results highlight the advantages of combining VMC with machine learning techniques in addressing complex many-body problems. The proposed method promises a versatile tool for investigating quantum systems, opening new avenues for future research and potential applications in quantum chemistry, condensed matter physics, and quantum computing. As we continue to refine and optimize our approach, we aim to further improve its precision and performance, with the goal of achieving even higher correlation energy capture for more complex systems.

- [1] D. Pfau, J.S. Spencer, A.G.D.G. Matthews, W.M.C. Foulkes, Ab initio solution of the many-electron Schrödinger equation with deep neural networks, *Phys. Rev. Res.*, 2(3), 033429 (2020).
- [2] I. Glehn, J. Spencer, D. Pfau, A Self-Attention Ansatz for Ab-initio Quantum Chemistry, (2022).
- [3] J. Hermann, J. Spencer, K. Choo, A. Mezzacapo, M. Foulkes, D. Pfau, G. Carleo, F. Noé, Ab-initio quantum chemistry with neural-network wavefunctions, (2022).
- [4] N. Yoshioka, W. Mizukami, F. Nori, Solving quasiparticle band spectra of real solids using neural-network quantum states, *Communications Physics*, 4(1), 106 (2021).



## TEXT EMBEDDINGS FOR FAKE NEWS CLASSIFICATION

**Oleksiy Khamar, Ihor Olenych, Oleh Sinkevych**

Ivan Franko National University of Lviv, 50 Drahomanova str., 79005, Lviv,  
Ukraine, [oleh.sinkevych@lnu.edu.ua](mailto:oleh.sinkevych@lnu.edu.ua)

The boom in the development of social networks, messengers and various blogs causes the spread of a large amount of fake information. Now, during the Russian war against Ukraine, the spread of false and manipulative information causes significant damage both to the country's security and distorts the coverage of events in the mass media of friendly countries. Therefore, an extremely important task for supporting the pro-Ukrainian information field is the development of automated systems for detecting fakes, in particular, in text-oriented sources.

Typically, text processing systems for the purpose of solving the problems of detection and classification of false information consist of several standard steps, which, however, are subject to customization. These steps consist in 1) development of information extraction and storage systems (scrapers and databases); 2) generation of embeddings using word2vec, Glove or more advanced models like BERT, GPT-3, LLaMA; 3) adding some auxiliary statistical text features by demand; 4) preparing predictive models from scratch or by fine-tuning existing ones; 5) deployment phase using RESTful API, cloud systems or local server.

With the emergence of large language models, the question arose of local storage of generated embeddings with corresponding texts in specialized vector databases: Qdrant, Milvus, Pgvector, etc. These databases allow to perform specific vector similarity search, information retrieval using the keywords and to serve other specialized requests.

The fake detection system, which is under active development, involves the integration of both classical embeddings and those generated by large transformer-based language models. Different vector databases have been investigated; in case of typical for such systems Python implementation we suggest Pgvector extension for PostgreSQL database which is easy to integrate. For the qualitative assessment of the generated embeddings, the results of news classification based on both typical LSTM/GRU neural networks and advanced transformers were investigated.

[1] <https://www.pinecone.io/learn/vector-database/>

[2] <https://medium.com/gft-engineering/vector-databases-large-language-models-and-case-based-reasoning-cfa133ad9244>

[3] Touvron, H., Lavril, T., Izacard, G., Martinet, X., Lachaux, M. A., Lacroix, T., ... & Lample, G. (2023). Llama: Open and efficient foundation language models. *arXiv preprint arXiv:2302.13971*.



## МОБІЛЬНИЙ ДОДАТОК ДЛЯ СУДДІВСТВА ТЕНІСНОГО МАТЧУ З ВИКОРИСТАННЯМ МІКРОСЕРВІСНОЇ АРХІТЕКТУРИ ТА СЕРВІСІВ Azure

Дзюрах Іван<sup>1</sup>, Клим Галина<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Львівський національний університет ім. Івана Франка, факультет електроніки та комп'ютерних технологій,  
вул. Драгоманова, 50, Львів, 79005, Україна  
ivan.dziurakh@lnu.edu.ua, ivandzurah@gmail.com

<sup>2</sup>Національний університет «Львівська політехніка»,  
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна  
halyna.i.klym@lpnu.ua, halyna.klym@lnu.edu.ua

Мобільні програми стають все більш популярними в останні роки завдяки своїй здатності забезпечувати зручність і доступність для користувачів. Щоб забезпечити бездоганну взаємодію з користувачем, покращити масштабованість і підвищити гнучкість розробники все більше мобільних додатків покладаються на мікросервіси та хмарні обчислення.

Відомо, що мікросервісна архітектура — це архітектурний стиль, який структурує програму як набір невеликих, слабо пов'язаних і незалежно розгорнутих сервісів. На відміну від монолітної архітектури, де додаток розробляється як єдина, тісно пов'язана одиниця, мікросервіси розбивають додаток на менші самодостатні сервіси, які можна розробляти, розгортати та керувати незалежно [1]. Microsoft Azure — хмарна платформа, яка пропонує середовище для розгортання широкого спектру сервісів. За допомогою Azure можна розміщувати сервіси, бази даних і віртуальні машини. Серед багатьох сервісів, які пропонує Azure, Azure Service Bus [2] забезпечує надійний обмін повідомленнями та зв'язок між сервісами, Azure Cosmos DB надає глобально розподілену NoSQL базу даних для безперебійного зберігання та пошуку даних, Azure SQL [3] пропонує повністю керовану реляційну базу даних.

Основна мета даної роботи полягає у вивченні особливостей мікросервісної архітектури та використання хмарних обчислювальних та хостингових сервісів, які надає платформа Microsoft Azure на основі створення додатку для суддівства тенісного матчу. Додаток призначений для тенісного судді. Суддя може судити тенісний матч за допомогою мобільного додатку на планшеті. Функціонал включає в себе обчислення рахунку та статистики матчу. Окрім цього, сторонні сервіси або пристрої можуть використовувати обчислений рахунок і статистику, наприклад табло стадіону.

Серед переваг даної розробки варто відзначити використання мікросервісної архітектури, яка є гнучкою в плані розширення існуючого функціоналу, а також можливість доступу до рахунку та статистики матчу інших сервісів. Останнім, але не менш важливим є те, що додаток може працювати в автономному режимі, не використовуючи інтернет для комунікації з сервісами.

[1] Thönes, J. (2015). Microservices. *IEEE software*, 32(1), 116-116.

[2] Larsson, H. (2017). *Azure Service Bus: en kravstudie*.

[4] Lang, W., Bertsch, F., DeWitt, D. J., & Ellis, N. (2015, August). Microsoft azure SQL database telemetry. In *Proceedings of the Sixth ACM Symposium on Cloud Computing* (pp. 189-194).





## PARALLEL IMPLEMENTATION OF ABC AND PSO SWARM ALGORITHMS

**Oleh Sinkevych, Yaroslav Boyko, Bohdan Sokolovskii, Mykhailo Pavlyk**  
Ivan Franko National University of Lviv, 50 Drahomanova str., Lviv, Ukraine,  
oleh.sinkevych@lnu.edu.ua

Swarm intelligence and nature inspired algorithms occupy a reliable place in the solution of many applied problems, which concern both the optimization of industrial processes and the programming of robotics. Examples of their applications are route finding problems, combinatorial optimization problems, training neural networks and tuning their hyperparameters [1, 2].

The strengths of these approaches are relatively easy parallelization, the ability to effectively search for a global minimum, and ease of implementation. Despite the positive qualities, the disadvantages of these algorithms are the lack of a strict mathematical justification and a significant number of calculations of the objective function during execution [3]. To overcome the latter drawback, different parallelization techniques are considered: multi-threading and multiprocessing computations performed on a single machine or clusters [4].

Research partially resulting in current paper was inspired by the next considerations: 1) investigation of effectiveness of swarm methods to perform computations implemented in popular Python 3 programming language which is the main tool in machine learning and data science fields; 2) exploring the parallel implementation of the popular and efficient swarm algorithms (ABC, PSO) on a single machine using multiprocessing and on a cluster using Celery [5] tool and MPI port; 3) because of Python 3, proposed results can be easily integrated within third-party machine learning prototypes.

Obtained results form the basis for future research on the use of swarm algorithms in fine-tuning low-complexity neural networks or ensemble models in parallel. These models can be considered as the collective intelligent entity shared among the workers who can fine-tune respective model. The example of such system is a network of intelligent agents (microcomputers like Raspberry Pi 3, 4) which share the common intelligent core, can communicate with each other and carry out exploration which, in turn, results in the fine-tuning process.

- [1] Yang X.-S., Karamanoglu M. Swarm Intelligence and Bio-Inspired Computation. Swarm Intelligence and Bio-Inspired Computation. 2013. P. 3–23.
- [2] Swarm Intelligence for Resource Management in Internet of Things. Elsevier, 2020.
- [3] Chopard B., Tomassini M. Performance and Limitations of Metaheuristics. *Natural Computing Series*. Cham, 2018. P. 191–203.
- [4] Hong Y., Ji Z., Liu C. Research of Parallel Artificial Bee Colony Algorithm Based on MPI. 2nd International Conference on Computer Science and Electronics Engineering (ICCSEE 2013), China, 22–23 March 2013. Paris, France, 2013.
- [5] Celery - Distributed Task Queue – Celery 5.2.7 documentation. Celery - Distributed Task Queue – Celery 5.2.7 documentation. URL: <https://docs.celeryq.dev/en/stable/>.



## ЗАСТОСУВАННЯ ЗГОРТКОВОЇ НЕЙРОННОЇ МЕРЕЖІ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ВИСОТИ ТРІЩИН ПО СИГНАЛАМ УЛЬТРАЗВУКОВОГО КОНТРОЛЮ

**Софія Співак, Руслан Єрмоленко**

Київський національний університет імені Т. Шевченка, фізичний  
факультет, вул. Академіка Глушкова, 4,  
[sspivak693@gmail.com](mailto:sspivak693@gmail.com), [ruslan.yermolenko@gmail.com](mailto:ruslan.yermolenko@gmail.com)

Застосування методів неруйнівного контролю обладнання критичних об'єктів, зокрема АЕС дозволяє підвищити безпеку експлуатації та запобігти можливим аваріям. Одним з найбільш небезпечних експлуатаційних дефектів є тріщина, яка в залежності від розмірів, зокрема висоти, може стати причиною руйнування елемента обладнання чи трубопроводу при експлуатації. Саме тому є важливим своєчасне виявлення та визначення розмірів дефекту для прийняття рішення про необхідність ремонту обладнання.

Ефективним методом виявлення тріщин в обладнанні АЕС є ультразвуковий контроль. Для визначення висоти тріщин зазвичай застосовують дифракційно-часову технологію (TOFD) [1]. При цьому ультразвукові сигнали технології TOFD досить часто є складними для інтерпретації, що підвищує імовірність помилки персоналу при аналізі результатів контролю.

В даній роботі продемонстровано можливість побудови моделі згорткової нейронної мережі, котра зможе передбачати розміри тріщини за сигналами ультразвукового контролю з застосуванням технології TOFD. Класифікаційна згорткова нейронна мережа побудована у фреймворку Keras, складалася з 12 шарів, містить шар уваги (attention) [2]. Діапазон передбачуваної висоти тріщини від 0 до 30 мм було розбито на 6 під діапазонів з кроком в 5 мм, наприклад 0-5мм, 5-10мм і т.д. Для навчання, валідації та тестування ефективності передбачення моделі було виконано моделювання ультразвукових сигналів при застосуванні технології TOFD. Було проведено більше 100 модельних експериментів, в котрих було промодельовано ультразвукові сигнали [3] від тріщин різної висоти та орієнтації. З використанням змодельованого набору даних виконано тренування та оптимізації гіперпараметрів нейронної мережі. На тестових даних, котрі не використовувалися при тренуванні вагів моделі та оптимізації гіперпараметрів були отримані наступні результати: точність (accuracy) становить 0.727, бінарна точність (binary accuracy) - 0.878.

Отримані результати демонструють можливість застосування згорткових нейронних мереж для визначення висоти тріщини за сигналами ультразвукового контролю. Для покращення точності передбачення висоти дефекту варто збільшувати розміри тренувального набору даних з можливим ускладненням архітектури мережі. Для практичного застосування слід також в тренувальні набори даних додавати реальні результати ультразвукового контролю відповідної технології TOFD.

[1] A. Hecht. Time of Flight Diffraction Technique (TOFD) - An Ultrasonic Testing Method for all Applications? NDTnet. Vol.2 No.09. Sep 1997.

[2] Ashish Vaswani, Noam Shazeer, Niki Parmar et al. Attention Is All You Need. arXiv:1706.03762. 6 Dec 2017.

[3] Igor Kadenko, Ruslan Iermolenko, Artem Kadenko, Nadiia Sakhno. VVER RPV UT Results Modeling with CIVA Software Application. NDT.net. Online Workshop: Simulation in NDT 2010 (SimNDT 2010), Vol. 15(9).





# AIR QUALITY FORECASTING USING MACHINE LEARNING

**Volodymyr Hura**

Ivan Franko National University of Lviv, Faculty of Electronics and Computer Technologies, str. Drahomanova 50, m. Lviv,  
volodymyrgura97@gmail.com

The quality of air is an important factor for the health and sustainability of the environment. If the air quality is poor, it can cause respiratory problems, cardiovascular diseases, and other health issues. Therefore, precise air quality forecasting is vital for policymakers, healthcare experts, and the general public.

Air quality forecasting has been significantly enhanced with the emergence of machine learning. These algorithms have the ability to analyze vast amounts of data and detect patterns that may be difficult for humans to identify. Our abstract will delve into the utilization of machine learning in air quality forecasting.

Let's start by talking about the various kinds of data utilized in air quality prediction. These consist of meteorological data - temperature, humidity, wind speed, and direction - along with air pollutant concentrations, such as particulate matter, ozone, and nitrogen oxides.

Next, we will discuss the machine learning algorithms that are commonly used for air quality forecasting, such as regression analysis, decision trees, random forests, and neural networks. These algorithms can learn the complex relationships between the input data and air pollutant concentrations and can make accurate predictions.

Finally, we will discuss the advantages and limitations of using machine learning for air quality forecasting. The advantages include the ability to analyze large amounts of data and make accurate predictions, while the limitations include the need for high-quality data and the possibility of overfitting.

In conclusion, machine learning has shown great promise for air quality forecasting. As more data becomes available, and machine learning algorithms become more sophisticated, air quality forecasting is expected to become even more accurate and reliable. This has the potential to improve public health and environmental sustainability by enabling policymakers, healthcare professionals, and the general public to take proactive steps to address air pollution.

- [1] Montefusco, A., & Triacchini, G. (2020). Machine learning for air quality forecasting: model selection and ensemble approach. *Environmental Modelling & Software*, 133.
- [2] Oyekunle, L. O., & Adewumi, A. O. (2021). Air quality index prediction using an optimized machine learning model. *Journal of Cleaner Production*, 280.
- [3] Saberian, B., Mokarian, Z., & Mokhtari, M. (2021). Hourly prediction of air pollutant concentrations using machine learning algorithms. *Journal of Cleaner Production*, 309.
- [4] Samson, R., & Kanaroglou, P. (2021). Advancements in the application of machine learning for air quality monitoring and prediction: A review. *Journal of Environmental Management*, 298



## СИСТЕМА ОБМІНУ ІНФОРМАЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ МІЖ КОРИСТУВАЧАМИ НА БАЗІ ВЕБ-САЙТУ

**Максим Винницький<sup>1</sup>, Галина Клим<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Національний університет «Львівська політехніка»,  
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна  
ihor.kuzma.ki.2019@lpnu.ua

<sup>2</sup>Львівський національний університет ім. Івана Франка,  
факультет електроніки та комп'ютерних технологій,  
вул. Драгоманова, 50, Львів, Україна  
halyna.i.klym@lpnu.ua, halyna.klym@lnu.edu.ua

Сьогодні, у час інформаційних технологій та епоху швидкого доступу до інформації, молодим авторам особливо важко показати себе та здобути визнання серед потенційних читачів [1-4]. Платформи для розміщення творів авторів є дуже важливими у цьому плані. Оскільки без належного просування важко стати впізнаваним та бажаним автором потенційних бестселерів. Створення такого зібраного ресурсу дозволить як авторам без затрат особливих ресурсів публікувати свої напрацювання, так і кінцевим користувачам насолоджуватись мистецтвом, відкривати для себе нові жанри та знайомитись з митцями. Такий ресурс збере та централізує всіх авторів, як комерційних, так і не монетизованих, і забезпечить доступ до всіх матеріалів по єдиному внеску (платній підписці) так і безкоштовно з певним обмеженням. Була пророблена дослідження даної проблеми і складений висновок, який запевняє у нагальності такої платформи.

Тому актуальною є робота щодо розроблення спеціалізованих систем для обміну інформаційними матеріалами між користувачами, що реалізуються на базі веб-сайту.

У процесі розробки було створено веб-ресурс автоматизованої інформаційної системи публікування та споживання контенту користувачами.

Задля досягнення поставленої мети виконано наступні задачі:

- Визначена актуальність створення веб-сервісу для молодих авторів.
- Здійснено вибір сучасних інструментів та аналіз методологій для розробки веб-сервісів та бази даних для них.
- Проаналізувано існуючі аналоги на ринку.
- Виконано моделювання та проектування процесу розробки веб-сервісу.
- Розроблено базу даних ресурсу.
- Проведено реалізацію веб-сервісу та його дизайну.

[1] Швачич, Г. Г., Толстой, В. В., Петречук, Л. М., Іващенко, Ю. С., & Гуляєва, О. А. (2017). Сучасні інформаційно-комунікаційні технології.

[2] В'юненко, О. Б., Толбатов, А. В., Агаджанова, С. В., Шандиба, О. Б., Толбатов, В. А., & Толбатов, С. В. (2015). Побудова систем моніторингу, аналізу та оцінки прийняття рішень регіонального рівня для ситуаційних центрів АПК.

[3] Богач І. В., Довгалець С. М., Дубовой В. М., Алгоритми розв'язання задач з програмування. Решебник. Вінниця: ВНТУ, 2017. 119 с.

[4] Андрущенко, В. Б., Балагура, І. В., & Ланде, Д. В. (2017). Інформаційні ресурси доступу та обміну науковою інформацією, системи ідентифікації науковців— можливості, недоліки, переваги. Матеріали міжнародної науково-технічної конференції «Інформаційні технології та безпека»(2 груд. 2016, м. Київ). Київ: ІПРІ, 180-191.



## ГЕОІНФОРМАЦІЙНА СИСТЕМА ВІДЕОСПОСТЕРЕЖЕННЯ НА ОСНОВІ РЕГІОНАЛЬНИХ ГЕОГРАФІЧНИХ ТА GPS ДАНИХ

**Руслан Гетьман<sup>1</sup>, Галина Клим<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Національний університет «Львівська політехніка»,  
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна  
ruslan.hetman.ki.2019@lpnu.ua

<sup>2</sup>Львівський національний університет ім. Івана Франка,  
факультет електроніки та комп'ютерних технологій,  
вул. Драгоманова, 50, Львів, Україна  
halyna.i.klym@lpnu.ua, halyna.klym@lnu.edu.ua

Геоінформаційна система (ГІС) відеоспостереження на основі регіональних географічних та GPS даних є актуальною темою дослідження в галузі інформаційних технологій та безпеки. Ця система дає змогу отримувати, обробляти та аналізувати дані з метою покращення безпеки в різних сферах діяльності, таких як охорона об'єктів, дорожня безпека, кризове управління та інші. ГІС відеоспостереження базується на використанні сучасних технологій геопросторового аналізу та обробки даних, таких як GPS, географічні інформаційні системи та відеоспостереження. Вона дозволяє зібрати дані з різних джерел та використовувати їх для створення геопросторових карт, відображення руху об'єктів, аналізу подій та сприяє вирішенню проблем безпеки. Така система може бути застосована у різних сферах діяльності, наприклад, в громадському транспорті, енергетиці, аеропортах, промислових об'єктах, на території національних парків та інших. Вона забезпечує ефективне відслідковування та моніторинг об'єктів, розпізнавання небезпечних ситуацій та дозволяє оперативно реагувати на них.

У даній роботі були використані різноманітні засоби для покращення користувацького досвіду. Для backend-розробки використовували Java, яка є однією з найпопулярніших мов програмування для створення веб-додатків. Додатково, використовували Spring, що є потужним фреймворком для створення веб-додатків на Java, та Mapstruct, що допомагає у взаємодії з базою даних. Для frontend-розробки використовували Angular, що є однією з найпопулярніших JavaScript-бібліотек для створення веб-додатків з високою швидкістю та масштабованістю. Додатково, використовували PrimeNG, що є набором компонентів UI для Angular, які роблять розробку швидшою та простішою. Зовнішні засоби, що були використані у проекті, включали PostgreSQL - систему управління базами даних з відкритим вихідним кодом, яка дозволяє зберігати та організувати великі обсяги даних, та FFmpeg - відкрите програмне забезпечення для конвертації відео та аудіофайлів. Використання Google Maps дозволило інтегрувати геодані та карти для зручної візуалізації даних та забезпечення кращої навігації користувачів. Для збереження бази даних та забезпечення її масштабованості та портативності використовувався Docker. Docker - це платформа для розробки, доставки та запуску додатків у знімках контейнерів, які можуть бути запуснені на будь-якому комп'ютері з встановленою платформою Docker. Використання Docker у проекті дозволило забезпечити швидку розгортання та налаштування середовища для розробки та випуску проекту на різних платформах без додаткових проблем.



## МОБІЛЬНИЙ ДОДАТОК ДЛЯ СТВОРЕННЯ СХЕМ ВИШИВКИ БІСЕРОМ

**Катерина Кондрак<sup>1</sup>, Галина Клим<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Національний університет «Львівська політехніка»,  
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна  
[kateryna.kondrak.ki.2019@lpnu.ua](mailto:kateryna.kondrak.ki.2019@lpnu.ua)

<sup>2</sup>Львівський національний університет ім. Івана Франка,  
факультет електроніки та комп'ютерних технологій,  
вул. Драгоманова, 50, Львів, Україна  
[halyna.i.klym@lpnu.ua](mailto:halyna.i.klym@lpnu.ua), [halyna.klym@lnu.edu.ua](mailto:halyna.klym@lnu.edu.ua)

У сучасному світі все більше людей цікавляться рукоділлям, а вишивка бісером займає одне з провідних місць в цій сфері. Але створення схем вишивки бісером є досить складним та часозатратним процесом, який можна спростити та зробити більш доступним для широкого кола користувачів за допомогою мобільного додатку [1,2]. Актуальність даної роботи полягає в тому, що на сьогоднішній день на ринку відсутні достатньо зручні та повнофункціональні мобільні додатки для створення схем вишивки бісером, тому розробка такого додатку може бути конкурентною перевагою на ринку. Такий додаток, який буде зручний та мати доступні інструменти, може бути дуже популярним та корисним для багатьох людей. Розробка такого додатку допоможе збільшити кількість людей, які займаються вишивкою бісером та зробити цей процес більш доступним для початківців.

У роботі реалізовано працездатний мобільний додаток для створення схем вишивки бісером, який буде використаний для особистих цілей та як інструмент для роботи у галузі вишивки.

Функціонал додатку побудовано за допомогою фреймворку UIKit [3,4], а сам додаток реалізовано на SWIFT 5. Перший екран, який ми бачимо після запуску додатку - це DrawinViewController. Цей екран відповідає за те, що відображається на екрані. Основним елементом, в якому відбувається весь функціонал, є клас BoardView (власний підклас UIView), який представлений на нашому DrawinViewController і є його Subview. BoardView, розпізнавши жести (дотики) користувача, викликає у собі функції для відтворення вмісту. BoardView може мати вигляд "сітки", просто переключивши перемикач, або вигляд "порожнього аркушу". У режимі "сітки" кожен квадрат - це Subview (дочірній елемент) BoardView. Кожного разу, коли палець користувача проходить по одній з комірок всередині, комірка фарбується в відповідний заздалегідь вибраний колір.

[1] F. Farook, M. Hollemans, UIKit Apprentice (2nd Edition), Razeware LLC, Virginia (2021), p.1151.

[2] H. Kumpli, S. Serafini, The Art of Bead Embroidery, Kalmbach Books, Colorado (2007), p.112.

[3] Cahill, B., & Cahill, B. (2021). UIKit in SwiftUI. UI Design for iOS App Development: Using SwiftUI, 159-168.

[4] Knaster, S., Malik, W., Dalrymple, M., Knaster, S., Malik, W., & Dalrymple, M. (2012). Introduction to UIKit. Learn Objective-C on the Mac: For iOS and OS X, 255-276.



## ВЕБ-ЗАСТОСУНОК ДЛЯ СТУДЕНТСЬКИХ ПЕТИЦІЙ

**Роман Косенко<sup>1</sup>, Галина Клим<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Національний університет «Львівська  
політехніка»,

вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна  
roman.kosenko.ki.2019@lpnu.ua

<sup>2</sup>Львівський національний університет ім. Івана Франка,  
факультет електроніки та комп'ютерних технологій,

вул. Драгоманова, 50, Львів, Україна  
halyna.i.klym@lpnu.ua, halyna.klym@lnu.edu.ua

З інтенсивним розвитком цифрових технологій, веб-застосунки стають все більш актуальними в усіх сферах життя, включаючи освіту. Веб-платформа для університетських петицій надає потужний інструмент, що допомагає студентам якісніше доносити свої ідеї, колективно приймати рішення та збільшувати свій вплив на університетську адміністрацію.

Однак, традиційні методи подачі петицій в основному неавтоматизовані та неефективні по часу. Додатки «Взаємодія» та «Київ-Цифровий» яскраво демонструють, що цифровізація процесу подачі державних петицій допомагає залучити більше активних користувачів та швидше популяризувати нові ідеї. Завдяки нашому веб-застосунку, студенти мають легко створювати, відстежувати та підтримувати петиції в режимі реального часу та подальшому реалізовувати ці ініціативи.

У процесі розробки системи використано сучасні технології та інструменти. Для реалізації внутрішньої логіки використовується NestJS — потужний фреймворк для створення легко тестованих, слабозв'язаних та простих в підтримці серверних програм Node.js [1-3]. NestJS використовує TypeScript, що гарантує безпеку типів і оптимізує код. Базою даних слугує PostgreSQL [4,5], надійна та масштабована система управління БД з відкритим вихідним кодом, яка гарантує безпеку зберігання особистих даних студентів та інформацію про петиції. Фронтенд розроблено з використанням React, відкритої JavaScript бібліотеки для реалізації інтерактивного користувацького інтерфейсу.

Веб-застосунок для студентських петицій сприяє заохоченню студентів до громадської діяльності та поліпшенню умов навчання. Завдяки сучасній програмній реалізації, ця система є надійною, оптимізованою, легкою у використанні та має user-friendly інтерфейс.

[1] Stabekk, Ariel. "Mastering NestJS: Learn to build a feature-rich, enterprise-grade web application using NestJS and Angular", Packt Publishing, 2021.

[2] Волошин В.В., Сергієнко В.В., Литвин В.О. Бази даних: Підручник.

[3] Nance, Ryan "Beginning Back-End Development with Node.js and Nest.js: Create, test, build, and secure RESTful APIs", Apress, 2023.

[4] Douglas, K., & Douglas, S. (2003). PostgreSQL: a comprehensive guide to building, programming, and administering PostgreSQL databases. SAMS publishing.

[5] Viloria, A., Acuña, G. C., Franco, D. J. A., Hernández-Palma, H., Fuentes, J. P., & Rambal, E. P. (2019). Integration of data mining techniques to PostgreSQL database manager system. Procedia Computer Science, 155, 575-580.



## АВТОМАТИЗОВАНА ІНФОРМАЦІЙНА СИСТЕМА ОБЛІКУ ТОВАРУ У ЛОГІСТИЧНІЙ КОМПАНІЇ

**Ігор Кузьма<sup>1</sup>, Галина Клим<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Національний університет «Львівська політехніка»,  
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна  
igor.kuzma.ki.2019@lpnu.ua

<sup>2</sup>Львівський національний університет ім. Івана Франка,  
факультет електроніки та комп'ютерних технологій,  
вул. Драгоманова, 50, Львів, Україна  
halyna.i.klym@lpnu.ua, halyna.klym@lnu.edu.ua

На даний момент для українців які потребують підтримки в надзвичайній ситуації в Україні та за її межами є життєво необхідна логістична допомога. Логістика дозволяє людям робити особистий внесок у вирішення суспільних проблем, брати участь у соціально важливих ситуаціях. Покращення управління логістичною діяльністю компанії є важливим для всіх, хто займається розповсюдженням товарів до кінцевих споживачів [1-4]. Тому необхідно поліпшити процес ухвалення управлінських рішень щодо збуту продуктів вітчизняних підприємств-виробників, щоб забезпечити населення достатньою кількістю хлібобулочних виробів та збільшити власний прибуток. Вчені, як закордонні, так і вітчизняні, вивчають теоретичні та методологічні аспекти цієї проблеми. Вони також зосереджуються на розвитку логістики та транспортної логістики, досліджуючи проблеми покращення логістичної діяльності вітчизняних продовольчих підприємств.

У процесі розробки було створено веб-ресурс автоматизованої інформаційної системи обліку товару у логістичній компанії.

Задля досягнення поставленої мети виконано наступні задачі:

- Визначена актуальність створення веб-сервісу для логістів.
- Виконаний вибір сучасних інструментів та аналіз методологій для розробки веб-сервісів та бази даних для них.
- Проаналізовано існуючі аналоги на ринку.
- Виконано моделювання та проектування процесу розробки веб-сервісу.
- Розроблено базу даних ресурсу.
- Проведено реалізацію веб-сервісу та його дизайну.

- [1] Полянська, А. С. (2008). Управління витратами у системі логістичних рішень підприємства. Вісник Національного університету "Львівська політехніка", (15), 633.
- [2] Плекан, У. М. (2019). Процесний підхід до організації обліку логістичних витрат виробничих підприємств. Галицький економічний вісник Тернопільського національного технічного університету, 56(1), 130-139.
- [3] Кудрявцева, О. В. (2022). Особливості системи інформаційної логістики підприємства. Економіка транспортного комплексу, (39), 115-115.
- [4] Кравець, О. В. Інформаційне забезпечення обліку логістичних витрат підприємства для прийняття управлінських рішень. Соціально-політичні, економічні та гуманітарні виміри європейської інтеграції України: зб. наук. пр. X Міжнар. наук.-практ. конф., м. Вінниця, 123.





## СИСТЕМА ЕКОНОМІЇ ТЕПЛОВОЇ ЕНЕРГІЇ У КВАРТИРИ

**Тарас Терендій<sup>1</sup>, Галина Клим<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Національний університет «Львівська політехніка»,  
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна  
taras.terendii.ki.2014@lpnu.ua

<sup>2</sup>Львівський національний університет ім. Івана Франка,  
факультет електроніки та комп'ютерних технологій,  
вул. Драгоманова, 50, Львів, Україна  
halyna.i.klym@lpnu.ua, halyna.klym@lnu.edu.ua

У сучасному світі люди все частіше зіштовхуються з проблемою економії енергії і видобутком енергії з відновлюваних джерел. Система «розумний будинок» дає можливість частково задовільнити потреби користувачів у цьому питанні [1-3]. У зв'язку з цим виникає необхідність розробки різних підсистем які можуть конкретно виконувати поставлені перед ними задачі. Система економії теплової енергії у квартирі є однією з них. Метою даної роботи є проектування і дослідження системи економії теплової енергії в квартирі. Типова система складається з різних датчиків моніторингу зміни температури і вологості таких як DHT22 на базі плати Arduino Uno.

У даній системі задіяні відповідні wi-fi модулі для передачі даних і управління системою через гаджет. Програмне забезпечення для даного мікроконтролера написано мовою C++ [4].

Також у даній роботі є можливість реалізувати власний мобільний додаток для керування підсистемою з гаджету під власні потреби кожного користувача. Так як система може включати давачі температури (датчики), пристрої регулювання, автоматичне налаштування температури в квартирі залежно від зовнішньої температури, можливість дистанційного регулювання через смартфон власника, регулювання температури залежно від вологості в квартирі, регулювання в залежності від часу доби (ніч, день) або від зовнішнього світла, і т.д.

- [1] Makieiev, S., & Virovets, S. (2020). Сучасна апаратура та обладнання систем «розумний будинок». Вісник НТУ «ХП». Серія: Проблеми удосконалення електричних машин і апаратів. Теорія і практика, (2), 16-20.
- [2] Федько, А. О., Зеленцова, І. Я., & Тягунова, М. Ю. (2019). Розробка та моделювання системи «розумний будинок» з підвищеною надійністю на базі Arduino [Електронний ресурс]. Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: Проблеми моделювання та автоматизації проектування.–2019, 1, 16-25.
- [3] Чижевська, М. А. (2019). Параметри інформаційної системи Розумний будинок. Наукові записки Українського науково-дослідного інституту зв'язку, (4), 61-67.
- [4] Сушук-Слюсаренко, В. І., Онаї, М. В., & Зверев, К. В. (2022). Програмне забезпечення для статистичного аналізу датчиків у системі «Розумний будинок». Збірник тез доповідей підготовлено за матеріалами Міжнародної наукової інтернет-конференції (випуск 73) 8-9 грудня 2022 р. на сайті [www.konferenciaonline.org.ua](http://www.konferenciaonline.org.ua), 89.





## ІНФОРМАЦІЙНА СИСТЕМА ДЛЯ ПРИГОТУВАННЯ СТРАВ ЗА КУЛІНАРНИМИ РЕЦЕПТАМИ

**Максим Урин<sup>1</sup>, Галина Клим<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Національний університет «Львівська політехніка», інститут комп'ютерних технологій, автоматики та метрології,  
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна  
maksym.uryn.ki.2019@lpnu.ua, max.urin2013@gmail.com

<sup>2</sup>Львівський національний університет ім. Івана Франка,  
факультет електроніки та комп'ютерних технологій,  
вул. Драгоманова, 50, Львів, Україна  
halyna.i.klym@lpnu.ua, halyna.klym@lnu.edu.ua

У сучасному світі люди активно користуються інформаційними системи пошуку та зберігання інформації у мережах. Оскільки кількість рецептів приготування страв стала максимально великою, постає питання зручної організації для варіантів приготування страв. У зв'язку з цим виникає необхідність розробки інформаційної системи для приготування страв за кулінарними рецептами. З одного боку, це пов'язано з ростом популярності онлайн-кулінарії та зростанням кількості людей, які хочуть готувати вдома та експериментувати зі стравами. З іншого боку, такі системи можуть бути корисним інструментом для професійних кухарів, рестораторів, дієтологів, спортсменів, які шукають нові ідеї та способи приготування різноманітних та смачних страв. До переваг інформаційних систем для приготування страв можна віднести збір та збереження великої кількості рецептів, швидкий доступ до рецептів та можливість пошуку за різними критеріями, такими як складники, тип страви, час приготування тощо. Крім того, такі системи дозволяють зберігати та організовувати улюблені рецепти та додавати свої власні рецепти, що можна ділитися з іншими користувачами.

У проєкті розробки даної інформаційної системи було використано різноманітні технології такі як: React, TypeScript, Styled-Components, Redux Toolkit, NodeJs та MongoDB. Клієнтська частина повинна бути простою та зрозумілою для усіх користувачів, тому для її реалізації було використано TypeScript та [1-3]. Також було використано Redux, який приймав роль збереження стану системи, включаючи обрані рецепти та історію перегляду. Також у роботі було частково залучені інші технології, такі як: React Router, React Hook Form, axios, Vcrupt, Express та Mongoose.

Для роботи даної системи потрібно запустити додаток серверної частини який за допомогою методів NodeJs та MongoDB повинен отримувати, зберігати в базах даних, опрацьовувати клієнтські запити, та надсилати оброблену інформацію назад. Також за допомогою вище перелічених компонентів була налагоджена серверна логіка, яка повинна опрацьовувати невідповідні запити від користувачів, для того щоб зберегти безпеку даних які містяться у MongoDB. Як результат налагодженого сервера отримано систему для кулінарних рецептів.

[1] Stoyan Stefanov | React: Up & Running: Building Web Applications. 2nd Ed.

[2] David Griffiths, Dawn Griffiths | React Cookbook: Recipes for Mastering the React

[3] Nabendu Biswas | Beginning React and Firebase. 1st Ed.



## СПЕЦІАЛІЗОВАНИЙ ВЕБ-САЙТ ДЛЯ ПРОДАЖУ ТОВАРІВ ТА ОБЛІКУ ПРОДУКЦІЇ

**Андрій Шпак<sup>1</sup>, Галина Клим<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Національний університет «Львівська політехніка»,  
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна  
andrii.shpak.ki.2019@lpnu.ua

<sup>2</sup>Львівський національний університет ім. Івана Франка,  
факультет електроніки та комп'ютерних технологій,  
вул. Драгоманова, 50, Львів, Україна  
halyna.i.klym@lpnu.ua, halyna.klym@lnu.edu.ua

У наш час, сервіси, як інтернет магазини зростають в популярності і все більше людей здійснюють покупки онлайн, спеціалізований веб-сайт для продажу товарів та обліку продукції стає надзвичайно актуальним і важливим інструментом для бізнесу. Саме такий сайт дозволяє підприємствам ефективно управляти продажами і складським обліком, забезпечуючи автоматичний контроль за запасами товарів, фіксуванням руху товарів та гнучкішим управлінням процесами виробництва і продажу. Крім того, спеціалізований веб-сайт дозволяє підприємствам більш ефективно залучати клієнтів і збільшувати продажі, забезпечуючи зручну та доступну платформу для покупців з усього світу. Таким чином, спеціалізований веб-сайт для продажу товарів та обліку продукції може значно поліпшити ефективність бізнесу, забезпечуючи більш точний контроль за продуктивністю, збільшенням продажів і задоволенням клієнтів.

Даний проєкт знаходиться на стадії розробки, але загальний дизайн із використанням таких технологій, як ASP.NET MVC Framework 4.8, EntityFramework як ORM і bootstrap, дозволяє нам створити потужний, функціональний, безпечний та надійний веб-додаток. За допомогою EntityFramework може легко працювати з базами даних, у нашому випадку ми використовуємо Microsoft SQL Server для ефективного зберігання та організації даних. ASP.NET MVC Framework 4.8 з контролером і механізмом перегляду пропонує широкий спектр можливостей для створення функціональних і логічно структурованих веб-сторінок. Bootstrap допомагає скоротити час розробки та спростити процес проектування, швидко створюючи цілісні веб-дизайни, які забезпечують адаптивний дизайн для оптимального відображення на різних пристроях і екранах.

Загалом, використання цих технологій дозволяє створити ефективний веб-додаток з високою продуктивністю, безпекою та зручною інтерфейсом для користувачів. Розробка на цих технологіях може допомогти бізнесу залучати більше клієнтів та збільшувати прибуток.

[1] Jeffrey Palermo, Jimmy Bogard, Eric Hexter, Matthew Hinze, Jeremy Skinner | Книга: ASP.NET MVC 4 in Action.

[2] Jake Spurlock | Книга: Bootstrap.

**АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК**

- АК А. В7  
 Amirulloieva N. C15  
 Apopii V. C18  
 Bhardwaj S.B. B11, B9  
 Bokotey O.O. C8  
 Bokotey O.V. C8  
 Boshernitsan V. C21  
 Bovgyra O. I3, C22  
 Boyko Ya. I6  
 Choudhry S. B11  
 Eliyashevskyy Yu. A13  
 Filep M.J. A16  
 Gourbilleau F. A15  
 Gupta N. B9, B10, B11, B4, B6, B7  
 Guranich P.P. C8  
 Hrytsak L. C2  
 Huk A. C10  
 Hura V. I8  
 Johari R. B6  
 Kalzhigitov N. D1  
 Kanarskyi T. C2  
 Kapustianyk V. A13  
 Karachevtseva A.V. A14  
 Karachevtseva A. C13  
 Karbovnyk I. C3  
 Kasheba M. F4  
 Kashuba N. A9  
 Kashyrina Ya.O. A12  
 Khamar O. I4  
 Khomenko K. H1  
 Khomenko O. H1  
 Khomenkov D. A15  
 Khomenkova L. A15  
 Klym H. C3  
 Kokhan O.P. A16  
 Kolomiets I. B3  
 Konstantinov V. C13  
 Konstantinov V.A. A14  
 Koplak O. C18  
 Korostenskyi R. G5  
 Kovalenko M. C22  
 Ksonzhyk M. G2  
 Kumar S. B9  
 Kunakova G. C15  
 Kurylenko R. B3  
 Kushnir O. C3  
 Maksymchuk D. G2  
 Malakhovska T.O. A16  
 Maslechko A. E1  
 Melekh B. F4  
 Melnichuk O. A15  
 Melnichuk, L. A15  
 Misakyan L. C1  
 Moroz M. I3  
 Mozolevskis G. C15  
 Muratov A.S. A12  
 Olenych I. G5, I2, I4  
 Pavlyk M. I6  
 Pogodin A.I. A16  
 Ponomaryov S. A15  
 Prytula M. I2  
 Razzokov A.Sh. E9  
 Roik O.S. A12  
 Sagan V. C13  
 Sagan V.V. A14  
 Semkiv I. A9  
 Senin K. A13  
 Shender I.O. A16  
 Shikura O. H1  
 Shishodia S. B10  
 Shmavonyan A. C1  
 Shmavonyan G. C1  
 Sinha A. B8  
 Sinkevych O. I2, I4, I6  
 Slivka A.G. C8  
 Sokolovski B. I6  
 Solovjov A. A6  
 Stretovych M. C14  
 Suslikov L.M. A16  
 Terekhov A. A6  
 Tkach P. C22  
 Turko B. C2, C3  
 Vasil'ev V. C2  
 Vasilevsky V. D1  
 Vasil'yev V. C3  
 Vira O. A13  
 Yarovy V. A6  
 Адамьян В. D6  
 Ангелов М. H2  
 Бабак А. A8  
 Бадерко І. G6  
 Баліка С. E6  
 Бардадим Р. E8  
 Бігдай В. A11, C12  
 Білик Р. A17  
 Біляк К. A11, C11, C12  
 Бовгира О. C16, C23  
 Бойко В. G1



---

Бойко Я. G7  
Бордун Б. A11, C11, C12  
Борчук Д. C19  
Брезвін Р.С. B15, A20  
Бурзаєв В. E7  
Ваврух М. F2  
Василевський В. D3  
Васильців В. A22  
Вергелес К.О. C9  
Винницький М. I9  
Винничук О. C20  
Воронов С.О. C17  
Гаврилова Н. F1  
Гасюк І. C19  
Гащук М. A22  
Генерал А. B1, B2  
Гетьман Р. I10  
Глубицький А. C20  
Гнатенко Х. D4  
Гогота О. I1  
Головенько Я. A8  
Голубцов А. A5  
Дзіковський Д. F2  
Дзюрах І. I5  
Дорожка Т. E8  
Дукарова С. E4, E5  
Єрмоленко Р. I1, I7  
Єрмоєнко О. A4  
Єрмоїна К. A10  
Єфіменко М. A8  
Жаба В. D3  
Жигіль А. A21  
Іванічок Н. C19  
Коваленко М. C16, C23  
Козаченко О. C23  
Калініна Т. E7  
Карандась Я. C7  
Кашуба А. A3  
Кевшин А. A1  
Кигим В. F3  
Клепач М. A19  
Клим Г. I9, I10, I11, I12, I13, I14, I15, I16  
Климкович С. C20  
Клочков І. A8  
Колесник Р. D5  
Комок І. E7  
Кондрак К. I11  
Кононюк С.О. B16  
Кончиць А. A18  
Коротун А. C4, C5, C6, C7  
Косенко Р. I12  
Кофлюк І. A11, C12  
Кошмак І. F6  
Красновид С. A18  
Кривцов В. A5  
Кузьма І. I13  
Кузьмін С. D6  
Куршель Д. A1  
Лашко Ю. D3  
Лис Р. A2, A21  
Лучечко А. A22  
Ляшук Т. G3, G4  
Максимчук Д. C11  
Маруцак Х. G7  
Мацаєнко А. C11  
Медвідь І. A11, C11, C12  
Мелех Б. F5, F7  
Мельничук Т. B14  
Мирончук Г. B14  
Мирончук Д. A1  
Монастирський Л. G1  
Мотруніч С. A8  
Мудрий С. A17  
Музика Т.М. B13  
Мурин М. I16  
Набуральна В. E2  
Невгасимова О. E4, E5  
Неймаш В.Б. C17  
Ніколаєнко В. C4  
Ніколенко А.С. C17  
Овсяник Р. A17  
Оліфір К. C5  
Ольховик І.В. C17  
Онисько М. C16  
Панас А. D2  
Паневник І. C20  
Перепелиця М. C6  
Петруша Т. G3, G4  
Петрушенко С. E4, E5  
Підгорний О.О. B16  
Повержук В. A7  
Повх В. C20  
Пришко І. B5  
Проноза В. E8  
Процак М. A11, C11, C12  
Рачій Б. C19  
Рудиш М.Я. B15, A20  
Сапріянчук П. D4  
Світличний Є. B2, B12  
Ситніков В. G6

Ситніков Т. G6  
Склепова С.В. C19  
Скобеєва В.М. C9  
Сминтина В.А. C9  
Солтис А. C20  
Сорокін В. A11, C12  
Співак С. I7  
Ставарський О.В. B13  
Стадник В. B17, B5  
Стадник В.Й. B15, A20  
Столярник О. E3  
Стрельчук В.В. C17  
Ступень П. G6  
Суворов О. C7  
Суховаа Т. E4, E5  
Терендій Т. I14  
Тимків Ю. A2  
Томіна А.-М. A18, A4  
Улесв А. F1  
Фалько А. II  
Федорчук М. A5  
Фтомин Н. B5  
Фудулей Н. B18  
Хвищун І. H2  
Хлебніков А. E7  
Хорольський О. E3  
Царьова Є. A10  
Цисар М. A8  
Чегель В.І. C17  
Чорнодольський Я.М. B13, B16  
Шаправський А.О. B15  
Шевелева К. E8  
Шевченко М. F5  
Шепелявий П.Є. C17  
Шпак А. II5  
Штаблавий І. A19  
Штука О. B17  
Щепанський П. B17  
Щепанський П.А. B15, A20  
Яковенко І. G7  
Яровий Я. A10