

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ**  
**Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова**

**NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE**  
**V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics**



**«Лашкарьовські читання»**  
**Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників**  
**«Lashkaryov's readings»**  
**Young scientists conference on semiconductor physics**

Збірник тез  
Abstract books  
Київ, Україна  
Kyiv, Ukraine

***Лашкарьовські читання - 2026***

Національна академія наук України

Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова  
Рада молодих вчених Інституту фізики напівпровідників  
ім. В.Є. Лашкарьова НАН України

УДК. 539.2

Збірник тез конференції молодих вчених з фізики напівпровідників «Лашкарьовські читання - 2026», Київ, 2-3 квітня 2026 року, Україна. – 97с.

Конференція «Лашкарьовські читання» проводиться для молодих вчених України та зарубіжжя з метою заохочення аспірантів, студентів та молодих вчених до активної наукової діяльності в сучасних областях фізики.

© Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова.

ISBN (електронне видання)

## Програма конференції

| 2 квітня 2026 року<br>(конференц-зал, 5-й поверх) |                                                                                                   |
|---------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 9 <sup>30</sup> – 9 <sup>50</sup>                 | Реєстрація учасників конференції                                                                  |
| 10 <sup>00</sup> – 10 <sup>20</sup>               | Відкриття конференції. Вступне слово від Дирекції ІФН, організаторів та членів конкурсної комісії |
| <b>Запрошені доповіді</b>                         |                                                                                                   |
| 10 <sup>20</sup> – 10 <sup>50</sup>               | Ярослав Романюк, Тема «Сучасний стан сонячної енергетики у світі»                                 |
| <b>10<sup>50</sup> – 11<sup>00</sup></b>          | <b>Перерва</b>                                                                                    |
| 11 <sup>00</sup> – 12 <sup>30</sup>               | Секційні доповіді                                                                                 |
| <b>12<sup>30</sup> – 13<sup>00</sup></b>          | <b>Кава-брейк</b>                                                                                 |
| 13 <sup>00</sup> – 15 <sup>00</sup>               | Секційні доповіді                                                                                 |

| 3 квітня 2026 року<br>(онлайн-формат) |                             |
|---------------------------------------|-----------------------------|
| 10 <sup>00</sup> – 12 <sup>00</sup>   | Секційні доповіді           |
| 12 <sup>00</sup> – 12 <sup>30</sup>   | <b>Перерва</b>              |
| 12 <sup>30</sup> – 15 <sup>00</sup>   | Секційні доповіді           |
| <b>15<sup>00</sup></b>                | <b>Закриття конференції</b> |

| 2 квітня 2026 року<br>(конференц-зал, 5-й поверх)<br>Секційні доповіді |                    |                                                                                                                                                                           |
|------------------------------------------------------------------------|--------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Напівпровідникове матеріалознавство                                    |                    |                                                                                                                                                                           |
| 11 <sup>00</sup> –11 <sup>15</sup>                                     | Костянтин Козоріз  | Вплив додаткового легування TiO <sub>2</sub> на червону люмінесценцію іону Mn <sup>4+</sup> в алюмінаті магнію.                                                           |
| 11 <sup>15</sup> –11 <sup>30</sup>                                     | Микола Єлісєєв     | Charge-fluid heating in quasi-ballistic plasmonic FETs                                                                                                                    |
| 11 <sup>30</sup> –11 <sup>45</sup>                                     | Райчев Олександр   | Граничне розсіювання в двовимірних топологічних ізоляторах.                                                                                                               |
| 11 <sup>45</sup> –12 <sup>00</sup>                                     | Юрій Ковальський   | Вплив термічного відпалу на властивості наноструктур ZnO-Zn, отриманих методом швидкого сонячного випаровування.                                                          |
| 12 <sup>00</sup> –12 <sup>15</sup>                                     | Ганна Кочубей      | Структурні дослідження хальконенідних напівпровідникових стекол складів (AsSe) <sub>100-x</sub> Ag <sub>x</sub>                                                           |
| Напівпровідникова ІЧ- і НВЧ- техніка                                   |                    |                                                                                                                                                                           |
| 12 <sup>15</sup> –12 <sup>30</sup>                                     | Андрій Шекера      | Вимірювання діаграми спрямованості пірамідальної рупорної антени та HRFZ-Si лінзи для оптимізації ТГц випромінювання у системах із позаосьовими параболічними дзеркалами. |
| 12 <sup>30</sup> –13 <sup>00</sup>                                     | Кава-брейк         |                                                                                                                                                                           |
| Перспективні та інноваційні розробки                                   |                    |                                                                                                                                                                           |
| 13 <sup>00</sup> –13 <sup>15</sup>                                     | Марія Хутько       | Фотохімічний синтез наночастинок срібла, вкритих полі(N-ізопропілакриламідом): морфологічна і спектральна характеристика та моделювання.                                  |
| 13 <sup>15</sup> –13 <sup>30</sup>                                     | Олексій Березников | Influence of size and interfacial effects on the electrophysical properties of ferroelectric nanocomposites.                                                              |
| Сенсорні системи                                                       |                    |                                                                                                                                                                           |
| 13 <sup>30</sup> –13 <sup>45</sup>                                     | Антон Білецький    | Features of excitation of spectral SPR in films of high-conductive metals.                                                                                                |
| 13 <sup>45</sup> –14 <sup>00</sup>                                     | Владислав Романчук | Study of the effect of annealing temperature on the polarization properties of polymethyl methacrylate.                                                                   |
| 14 <sup>00</sup> –14 <sup>15</sup>                                     | Валерій Сіренко    | 2d гібридні перовськіти як перспективні матеріали для фотодетекції у широкому спектральному діапазоні.                                                                    |
| 14 <sup>15</sup> –14 <sup>30</sup>                                     | Ілля М'ятка        | Дослідження впливу інкорпорованих частинок перехідних металів (Pd, W, Pd/W) в пористу матрицю кремнію на чутливість сенсорних структур до карбон діоксиду.                |

3 квітня 2026 року  
(онлайн-формат)  
Секційні доповіді

### Напівпровідникове матеріалознавство

|                                     |                     |                                                                                                                                       |
|-------------------------------------|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 10 <sup>00</sup> – 10 <sup>15</sup> | Дар'я Кузнєцова     | Вуглецеві підкладки як перспективний компонент органічно-неорганічних гібридів для фотоелектричного застосування.                     |
| 10 <sup>15</sup> – 10 <sup>30</sup> | Тарас Монастирський | Чисельні розрахунки енергетичного спектра дірки у квантових точках різної конфігурації в рамках моделі Латтінджера.                   |
| 10 <sup>30</sup> – 10 <sup>45</sup> | Владислава Гузєва   | Optical and Spectral Properties of Silicon Nanoparticle Colloidal Solutions Prepared via Mechanical.                                  |
| 10 <sup>45</sup> – 11 <sup>00</sup> | Денис Стеценко      | Charge Transport and Dielectric Response of the Spark-Plasma Sintered Barium Titanate Ceramics with Different Carbon Content.         |
| 11 <sup>00</sup> – 11 <sup>15</sup> | Владислав Колупасєв | Діелектричні властивості та фазові діаграми нанопорошків Bi <sub>1-x</sub> Sm <sub>x</sub> FeO <sub>3</sub> .                         |
| 11 <sup>15</sup> – 11 <sup>30</sup> | Богдан Бойко        | Оптичні характеристики плівок ZnMgO для застосування у фотодетекторах.                                                                |
| 11 <sup>30</sup> – 11 <sup>45</sup> | Віталій Ганулич     | Radiation physics of chalcogenide glasses: binary systems As <sub>a</sub> X <sub>1-a</sub> , X=S, Se, Te.                             |
| 11 <sup>45</sup> – 12 <sup>00</sup> | Станіслав Сергійчук | Дослідження SERS-активних підкладок на основі технології срібного дзеркала для детектування аналогів вибухових речовин та біомолекул. |
| 12 <sup>00</sup> – 12 <sup>30</sup> | Перерва             |                                                                                                                                       |

### Сенсорні системи

|                                     |                 |                                                                                                                 |
|-------------------------------------|-----------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 12 <sup>30</sup> – 12 <sup>45</sup> | Богдана Жара    | Technological Aspects and Electrophysical Characteristics of CdTe Photodetectors.                               |
| 12 <sup>45</sup> – 13 <sup>00</sup> | Михайло Романов | Розробка технології підготовки матеріалів для створення квантових сенсорів на основі точкових контактів Янсона. |
| 13 <sup>00</sup> – 13 <sup>15</sup> | Вадим Бойчук    | Термоелектричні сенсори теплового потоку з комп'ютерною системою керування та обробки результатів вимірювань.   |
| 13 <sup>15</sup> – 13 <sup>30</sup> | Віктор Кузнєцов | Fluorescence quenching of MEH-PPV via gold and silver nanoparticles in aqueous solution                         |

### Напівпровідникова ІЧ- і НВЧ- техніка

|                                     |               |                                                                                                          |
|-------------------------------------|---------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 13 <sup>30</sup> – 13 <sup>45</sup> | Анна Євменова | Influence of Ion Implantation on the Structural and Morphological Properties of HgCdTe Epitaxial Layers. |
|-------------------------------------|---------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|

### Перспективні та інноваційні розробки

|                                     |                 |                                                                                                          |
|-------------------------------------|-----------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 13 <sup>45</sup> – 14 <sup>00</sup> | Антон Подвіянюк | Порівняльний аналіз впливу розрядності АЦП на енергетичну роздільну здатність сцинтиляційних детекторів. |
| 14 <sup>00</sup> – 14 <sup>15</sup> | Іван Ревуцький  | Розробка схеми функційної для системи вимірювання параметрів медичного терапевтичного обладнання.        |
| 14 <sup>15</sup> – 14 <sup>30</sup> | Іван Дзюрах     | Машинне навчання для класифікації пошкоджень в ультразвуковій діагностиці.                               |

### Фотовольтаїка та енергозбереження

|                                     |                    |                                                                                                                                          |
|-------------------------------------|--------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 14 <sup>30</sup> – 14 <sup>45</sup> | Тетяна Коляджин    | The impact of terrain, geographical and climatic conditions on the efficiency of solar panels.                                           |
| 14 <sup>45</sup> – 15 <sup>00</sup> | Владислав Калюжний | Electronic Transport in AlGaIn/GaN Nanowires Under Ultraviolet Excitation and Edge Depletion Effect, Studied in a Wide Temperature Range |

## **Секція 1**

***Напівпровідникове  
матеріалознавство***

***Semiconductor Materials***

## Діелектричні властивості та фазові діаграми нанопорошків $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$

В.О. Колупасєв<sup>1</sup>, О.С. Пилипчук<sup>1</sup>, В.В. Вайнберг<sup>1</sup>, В.М. Порошин<sup>1</sup>, І.В. Фесич<sup>2</sup>, Л. Д. Демченко<sup>3,4</sup>, Є.А. Єлісєєв<sup>5</sup>, Г.М. Морозовська<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Інститут фізики НАН України, пр. Науки 46, Київ, 03028, Україна  
E-mail: kolupaiev.v.o@gmail.com

<sup>2</sup> Київський Національний університет імені Тараса Шевченка, 01030, Київ, Україна

<sup>3</sup> Stockholm University, Department of Chemistry, Sweden

<sup>4</sup> Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського", Берестейський проспект, 37, м. Київ, 03056, Україна

<sup>5</sup> Інститут проблем матеріалознавства імені І.М. Францевича НАН України, вул. Омеляна Пріцака 3, 03142, Київ, Україна

Нанорозмірні мультифероїки з різними розмірами та формами є базовими моделями для вивчення полярної, антиполярної та магнітної орієнтації, а також магнітоелектричної взаємодії. Оксид вісмуту-самарію ( $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ ) є модельним ортоферитом, полярні та магнітні властивості якого були достатньо вивчені для об'ємних та тонкоплівкових зразків. Проте властивості порошків наночастинок  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  менш досліджені теоретично та експериментально, незважаючи на те, що вони мають властивості, що можуть бути використані в широкому спектрі застосувань, наприклад: для зберігання енергії [1] або магнітної гіпертермії [2], а також у сучасних напівпровідникових пристроях [3].

Було проведено серію експериментальних вимірювань та аналіз температурної залежності діелектричної проникності нанопорошків  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ . Ефективна діелектрична проникність нанопорошків має характерні зміни у двох температурних діапазонах, а саме: повільне зростання від 20°C до 250 – 300°C, за яким слідує швидке зростання в діапазоні 300°C – 400°C, що може призвести до формування максимуму при вищих температурах. Величина діелектричної проникності в цих діапазонах і температура переходу між ними залежать немонотонно від вмісту Sm.

Розрахунки впливу феро-іонного зв'язку на діелектричні властивості, морфологію структури доменів і фазові стани були виконані в рамках підходів Гінзбурга-Ландау-Девоншира і Стефенсона-Хайленда [4, 5]. Теоретичні оцінки та результати комп'ютерного моделювання пояснюють основні тенденції експериментально спостережуваних температурних залежностей ефективної діелектричної проникності, що дозволяє зрозуміти взаємозв'язки між температурною поведінкою діелектричних властивостей, морфологією структури доменів та фазовим станом наночастинок  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ .

Фазовий стан об'ємного  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  в залежності від вмісту Sm x і температури T показано на Рис. 1(а). Фазовий стан сферичних наночастинок  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  із середнім радіусом R=50 нм в залежності від вмісту Sm x і температури T показано на Рис. 1(б). Спонтанний полярний порядок існує у фазах FE та FEI. Спонтанний антиполярний порядок існує у фазах FEI та AFE і поступово зникає при наближенні до межі FEI-FE, а також зникає при наближенні до межі AFE-NP. Антиполярний порядок досягає максимальних значень на межі FEI-AFE. Типові зміни температури фероелектричної доменної структури всередині наночастинок  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  розміром 100 нм при x = 0,08 показані на Рис. 1(с). Видно, що однодоменний стан спочатку перетворюється на дводоменний, потім на багатодоменний, потім доменні смуги стають

низькоконтрастними і зникають вище температури фазового переходу FE-NP. Залежності діелектричної сприйнятливості наночастинок  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  (у відносних одиницях) від вмісту Sm  $x$ , розраховані для температур росту, показані на Рис. 1(d) синіми, зеленими, червоними та чорними кривими.

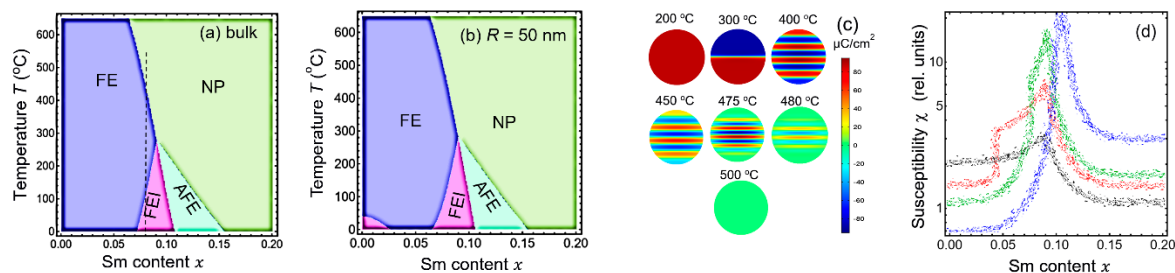


Рис. 1. Фазові діаграми об'ємного  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  (а) та сферичних наночастинок  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  із середнім радіусом  $R = 50$  нм (б) залежно від вмісту Sm  $x$  та температури  $T$ . (Адаптовано з [5]) (в) Зміни температури фероелектричної доменної структури всередині наночастинок  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  розміром 100 нм  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  при  $x = 0,08$ . (d) Діаграма діелектричної сприйнятливості (у відносних одиницях) наночастинок  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  за вмістом Sm  $x$ , розрахована для температур росту (сині, зелені, червоні та чорні криві);  $R = 50$  нм.

Хімічно контрольована діелектрична проникність є ключовим фактором для контролю електрофізичних властивостей, а саме: магнітоелектричний ефект і електрична провідність. Тому результати роботи можуть допомогти у створенні фероїків з індивідуальними та/або контрольованими полярними та діелектричними властивостями, а також у пошуку нових способів застосування в нанoeлектроніці та зберіганні енергії.

**Подяки.** Робота О.С.П. та Г.М.М. фінансується Національним фондом досліджень України (проект 2023.03/0132 «Багатократно вироджені метастабільні стани спонтанної поляризації в нанофероїках: теорія, експеримент та перспективи цифрової нанoeлектроніки»). Робота В.В.В. та В.М.П. фінансується Цільовою програмою Національної академії наук України, проект № 5.8/26-П «Енергозберігаючі та екологічно чисті нанорозмірні фероїки для розвитку сенсорики, нанoeлектроніки та спітроніки». Робота Є.А.Є. фінансується Національним фондом досліджень України (проект 2023.03/0127 «Кремній-сумісні сегнетоелектричні нанокompозити для електроніки та сенсоріки»).

1. Amira Bougoffa, E. M. Benali, A. Benali, M. Bejar, E. Dhahri, M. P. Graça, M. A. Valente, G. Otero-Irurueta, B. F. Costa. Investigation of temperature and frequency dependence of the dielectric properties of multiferroic  $(\text{La}_{0.8}\text{Ca}_{0.2})_{0.4}\text{Bi}_{0.6}\text{FeO}_3$  nanoparticles for energy storage application. // RSC Advances.- 2022.- **12**, N 11.-P. 6907–6917, <https://doi.org/10.1039/d1ra08975g>.

2. Kyrillos Papadopoulos, Eirini Myrovali, Dimitrios Karfaridis, Michael Farle, Ulf Wiedwald, Mavroeidis Angelakeris. Cation substitution and size confinement effects on structure, magnetism and magnetic hyperthermia of  $\text{BiFeO}_3$ -based multiferroic nanoparticles and Hydrogels. // Journal of Alloys and Compounds.- 2023.- **969**.-P. 172337, <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.172337>.

3. Samanta Anindita, M.N. Goswami, P.K. Mahapatra. Nickel doped ZnO nanoparticles as a novel photocatalytic and Multiferroic Semiconductor. // Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures.- 2024.- **158**.-P. 115885, <https://doi.org/10.1016/j.physe.2023.115885>.

4. O.S. Pylypchuk, V.O. Kolupaiev, I.V. Fesych, V.N. Poroshin, A.N. Morozovska. Investigation of Electrophysical Properties, Phase Diagrams and Charge Carrier Transfer in  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ . // Ukrainian Journal of Physics.- 2025.- **70**, N 10.-P. 717, <https://doi.org/10.15407/ujpe70.10.717>.

5. A.N. Morozovska, E.A.Eliseev, I.V. Fesych, Y.O. Zagorodniy, O.S. Pylypchuk, E.V. Leonenko, M.V. Rallev, A.D. Yaremkevych, L.P. Yurchenko, L. Demchenko, S.V. Kalinin, O.M. Fesenko. Reentrant polar phase induced by the ferroionic coupling in  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$  nanoparticles. // Physical Review B.- 2024.- **110**, N 22.-P. 1–18, <https://doi.org/10.1103/physrevb.110.224110>.

## Radiation physics of chalcogenide glasses: binary systems $\text{As}_\alpha\text{X}_{1-\alpha}$ , $\text{X}=\text{S}, \text{Se}, \text{Te}$

V.P. Hanulych, N.I. Svatiuk, O.M. Pop, V.T. Maslyuk  
[hanulychvitalij@gmail.com](mailto:hanulychvitalij@gmail.com)

*Institute of Electronic Physics, NAS of Ukraine, 21 Universytetska St., Uzhhorod,  
88000, Ukraine*

It is known that chalcogenide glassy semiconductors are promising as active and passive elements in modern optoelectronics, especially in the IR range. This is due to the manufacturability of both their synthesis in the glassy state in the form of bulk and film structures, and the presence of a number of attractive characteristics for practical application: transparency in the mid- and far-IR range, nonlinear optical susceptibility, and high photosensitivity. Chalcogenide glasses (CG) are amorphous materials formed on the basis of chemical elements of the 6th group of the periodic table with modifiers, as a rule, atoms of the 4th and 5th groups, such as Si, Ge, As, Sb.

A feature of the structure of CG is the presence of a covalently crosslinked structural network, which is formed by the repetition of Muller structural units (s.u.) of types  $\text{XX}_{2/2}$ ,  $\text{AsX}_{3/2}$ ,  $\text{As}_2\text{X}_{4/2}$ , etc. The lability of the structural network and the possibility of changing the ratio of s.u. under the influence of external factors of various nature explain both the high photosensitivity of CG and their high radiation stability. Thus, even after significant doses of nuclear radiation, CG retains a high crosslinking of the structural network and the almost complete absence of broken or dangling chemical bonds. The combination of these features of CG makes them interesting objects of research for understanding the nature of the stability of matter. Previously, in works [1,2], the possibility of using the method of structural combinations based on the Ball&Stick model to build the foundations of such a theory was shown. This approach uses the representation of color statistics, which considers the statistical nonequivalence of atoms even of the same type, having different bond energies in the structure, and the possibility of switching homo-, hetero- chemical bonds of CG under the action of radiation. The importance of considering the switching of chemical bonds during photostructural transformations in CG was noted in [3]. Another stage of such a theory establishes the dependence between the ratio of homo-, hetero-bonds and the Muller structural units, which parameterize the physicochemical characteristics of glasses.

This report presents the results of the study of radiative transformations of CG based on the binary system  $\text{As}_\alpha\text{X}_{1-\alpha}$ ,  $\text{X}=\text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ , hereinafter  $\text{X} = \text{S}$ . The theory considers a model cluster of CG containing  $N$  atoms (of which  $\alpha N$  As atoms, and  $(1-\alpha)N$  S atoms), in which there are  $x$  single homobonds As-As,  $y$  heterobonds As-S and  $z$  homobonds S-S. It is easy to see that the relations relate these quantities:

$$\begin{cases} 2x + y = m\alpha N \\ 2z + y = n(1 - \alpha)N \end{cases} \quad (1)$$

Here,  $m$  is the valence of As,  $m=3$ ,  $n$  is the valence of S,  $n=2$ . The indicated model approach considers the CG as a non-additive structure, the energy of which is determined by the sum of the energies of its covalent bonds, but by the number of atoms  $N$ :

$$E_{\text{CG}} = x E_{\text{As-As}} + y E_{\text{As-S}} + z E_{\text{S-S}} = E_0 + \Delta y \quad (2)$$

Here,  $E_0 = N (m \alpha E_{\text{As-As}} + n (1-\alpha) E_{\text{S-S}})/2$ , the parameter  $\Delta = E_{\text{As-S}} - (E_{\text{As-As}} + E_{\text{S-S}})/2$  is associated with the difference in electronegativities of the As and S atoms. The configuration

diagram, which demonstrates the presence of several metastable states of CG, is presented in Fig. 1. The configuration coordinates  $\{R_{n(y)}\}$  given here are associated with the radiation-induced switching of homo- and heterobonds of CG.

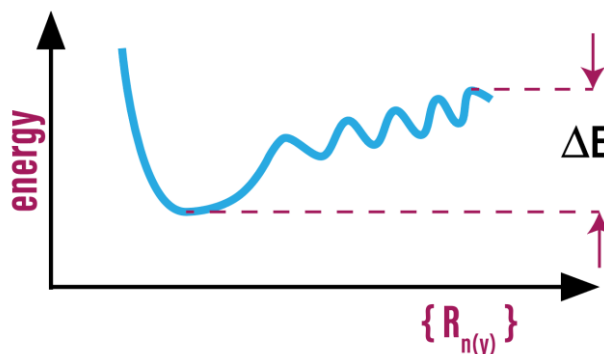


Fig. 1 Configuration diagram of metastable states of CG, which can be realized under the action of radiation. The global extremum corresponds to the state of the CG with maximally saturated heterobonds.

It can be seen that for the specified binary system of CG, the region of change of the number of heterobonds  $y$  is determined from the equation:

$$0 \leq y \leq \begin{cases} \alpha Nm & \text{for } \alpha \leq \frac{n}{n+m} \\ (1 - \alpha)Nn & \text{for } \alpha \geq \frac{n}{n+m} \end{cases} \quad (3)$$

To study radiation-induced changes in the parameters of CG, it is necessary to establish the relationship between the Muller structural units and the number of heterobonds  $y$  (3). This report analyzes the following options:

Option I. In this case, the chemical-structural formula of the CG is  $\alpha_1 \text{AsAs}_{3/3} \cdot \alpha_2 \text{AsX}_{3/2} \cdot \alpha_3 \text{XX}_{2/2}$ , where the following relationship exists between the parameters  $\alpha_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) and, for example, the number of heterobonds  $y$ :

$$\alpha_1 = \frac{3N\alpha - y}{3N - \frac{y}{2}}, \quad \alpha_2 = \frac{2y}{3N - \frac{y}{2}}, \quad \alpha_3 = \frac{6N(1 - \alpha) - 3y}{6N - y}.$$

Option II. The chemical-structural formula of the CG is  $\beta_1 \text{AsAs}_{3/3} \cdot \beta_2 \text{As}_2\text{X}_{4/3} \cdot \beta_3 \text{XX}_{2/2}$  (composition enriched in As). The relationship between the parameters  $\beta_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) and  $y$  is as follows:

$$\beta_1 = \frac{2N\alpha - y}{2N - y}, \quad \beta_2 = \frac{y}{2N - y}, \quad \beta_3 = \frac{2N(1 - \alpha) - y}{2N - y}.$$

Option III. The chemical-structural formula of the CG is  $\gamma_1 \text{As}_2\text{X}_{4/2} \cdot \gamma_2 \text{As}_2\text{X}_{3/2} \cdot \gamma_3 \text{XX}_{2/2}$  (chalcogen-enriched composition). In this case, there is the following relationship between the parameters  $\beta_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) and  $y$ :

$$\gamma_1 = \frac{3N\alpha - y}{\frac{y}{2} - 2N\alpha + N}, \quad \gamma_2 = \frac{2y - 4N\alpha}{\frac{y}{2} - 2N\alpha + N}, \quad \gamma_3 = \frac{2N(1 - \alpha) - y}{y - 4N\alpha + 2N}.$$

The report also discusses the information capacity of the CG.

1. V. Maslyuk. A model for maxima in the heat capacities of chalcogenide glasses // Journal of Non- Crystalline Solids.-1997.-212, N 1.-P. 80-84.
2. V. Maslyuk. Stable states and ordering in chalcogenide vitreous semiconductors // Physica Status Solidi (B): Basic Solid State Physics.-1990.-161, N 1.-P. 43-54.
3. Tran Tri Nang, Masahiro Okuda, Tatsuhiko Matsushita. Photo-induced absorption change in some Se-based glass alloy systems // Physical Review B.-1979.-19, N 2.-P. 947-955.

## Modelling of physical processes in thin CdTe films, taking into account fluctuation-induced inhomogeneities

V.M. Hrytsuliak, T.M. Mazur

*Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas, 15 Karpatska St., Ivano-Frankivsk, 76019, Ukraine*  
vitalii.hrytsuliak-tz251@nung.edu.ua

Thin CdTe-based semiconductor films are promising materials for optoelectronic devices, photodetectors and solar cells due to their direct bandgap and high absorption coefficient [1]. At the same time, their electrophysical properties are largely determined by the presence of defects, spatial inhomogeneities and potential fluctuations arising during the film growth process [1,2]. In this context, there is a pressing need to develop models that take into account random components in the transport parameters. This paper presents a generalised stochastic model of charge carrier transport that accounts for spatially correlated fluctuations in transport parameters and enables a quantitative relationship to be established between microstructural inhomogeneities and the macroscopic properties of the material.

The evolution of the charge carrier concentration  $n(x,t)$  in a thin film is described by the equation:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D(x) \frac{\partial n}{\partial x} \right] - \mu(x) E \frac{\partial n}{\partial x} - \frac{n}{\tau(x)} + G(x, t),$$

where the diffusion coefficients  $D(x)$ , mobility coefficients  $\mu(x)$  and lifetime coefficients  $\tau(x)$  contain random components:

$$D(x) = D_0 + \delta D(x), \quad \mu(x) = \mu_0 + \delta \mu(x), \quad \tau(x) = \tau_0 + \delta \tau(x).$$

Fluctuations in the parameters are caused by microstructural inhomogeneities in the films and can be described by stochastic processes with an exponential correlation function:

$$\langle \delta D(x) \delta D(x') \rangle = D_f^2 \exp \left( -\frac{|x - x'|}{l_c} \right),$$

where  $l_c$  is the correlation length.

It has been shown that the presence of random components in the transport coefficients leads to a reduction in the effective mobility and diffusion of charge carriers, their partial localisation, and the formation of density tails. The effective diffusion coefficient can be estimated as:

$$D_{\text{eff}} = D_0 - \frac{D_f^2}{kT}.$$

Based on the proposed approach, an analytical estimate of the effective diffusion coefficient has been obtained, which is consistent with the results of numerical modelling.

Numerical calculations have shown that as the amplitude of fluctuations increases, the effective diffusion coefficient decreases by 15–25 %, and the mobility of carriers to 0.7–0.8 of the initial value. It has been established that spatial fluctuations lead to the localisation of charge carriers and the formation of inhomogeneous concentration profiles (Fig. 1), as well as to the appearance of density of states tails and non-linearity in the current-voltage characteristics. In particular, the width of the density of states tails reaches 20–40 meV, which is consistent with experimental data for polycrystalline CdTe films.

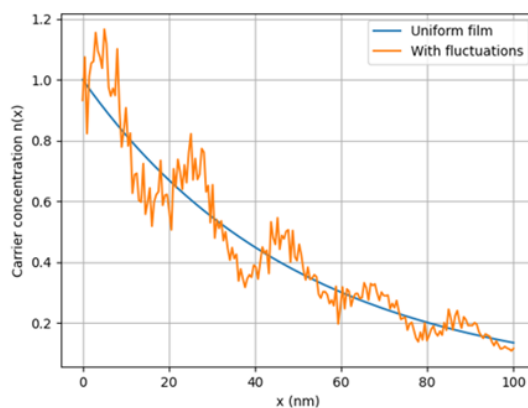


Fig. 1. Spatial profiles of the charge carrier concentration  $n(x)$  in a thin CdTe film: 1 – without taking fluctuations into account; 2 – taking fluctuations into account.

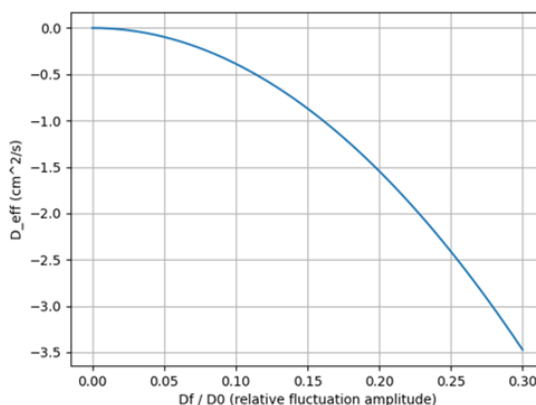


Fig. 2. Dependence of the effective diffusion coefficient  $D_{\text{eff}}$  on the relative fluctuation amplitude  $D_f/D_0$ .

Fig. 2 shows the dependence of the effective diffusion coefficient on the amplitude of fluctuations, demonstrating a reduction in transport properties in heterogeneous media. Thus, the proposed approach and the computational experiments conducted allow for a deeper understanding of transport mechanisms in thin films and can be used to optimise their growth technologies and improve the efficiency of CdTe-based devices.

Contributions of the authors.

V.M. Hrytsuliak: research, drafting of the initial version, submission of the manuscript.

T.M. Mazur: conceptualisation, methodology, drafting – peer review and editing, academic supervision.

Acknowledgments. The research of V.M. Hrytsuliak, and T.M. Mazur was funded by the National Research Foundation of Ukraine (project 2025.07/0427, “Newest complex probabilistic methods for studying asymptotic properties of analytical solutions of differential equations represented by multiple random series and integrals and their potential applications”, 0126U002547).

1. Mazur T.M., Prokopiv V.V., Mazur M.P., Pysklynets U.M. Solar cells based on CdTe thin films // *Physics and chemistry of solid state*. – 2021. – **22**, N 4. – P. 817-827.
2. Mazur T.M., Mazur M.P., Vakaliuk I.V. Solar cells based on CdTe thin films (II Part) // *Physics and chemistry of solid state*. – 2023. – **24**, N. 1. – P. 134-145.

## Core-shell structure $\text{MnO}_2@\text{CeO}_2$ for supercapacitor application

**Kolkovskiy P.I.<sup>1</sup> Yaremiy I.P.<sup>2</sup> Shlapa Y.Y.<sup>1</sup> Belous A.G.<sup>1</sup> Kotsuybysky V.O.<sup>2</sup> Rachiy B.I.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>V.I. Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

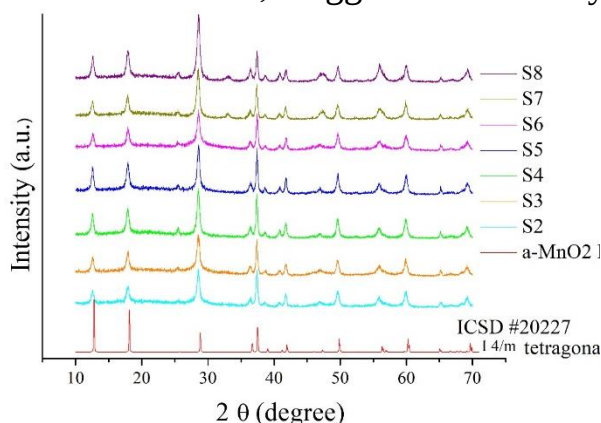
[pkolkovskyy@gmail.com](mailto:pkolkovskyy@gmail.com)

<sup>2</sup>Vasyl Stefanyk Carpathian National University, Ivano-Frankivsk, Ukraine

In electrochemical supercapacitors, charge storage relies on fast surface redox reactions and efficient ion transport within the electrode–electrolyte interface. Consequently, electrode materials must provide a high density of electrochemically active sites, sufficient electronic conductivity, and a porous architecture that enables rapid diffusion of electrolyte ions. The overall device performance is strongly influenced by the structural stability and compatibility of the electrode components under repeated cycling. One of the key challenges limiting large-scale deployment is the performance degradation that arises from resistive losses, sluggish ion mobility, and structural fatigue during long-term operation, particularly under high current densities.

In this work the  $\alpha\text{-MnO}_2@\text{CeO}_2$  nanocomposites (S1–S8) were organized into three series reflecting the synthesis conditions of the  $\text{CeO}_2$  precursors reported by Shlapa et al. [1], where precipitation was carried out at constant pH = 9 in mixed water–alcohol media. Series A (S1–S3) comprises in-situ composites prepared using a  $\text{CeO}_2$  precursor obtained in 25 vol.% IPA, with precursor loadings of 5, 10, and 15 %, enabling a controlled assessment of the effect of increasing  $\text{CeO}_2$  content on nucleation and composite formation. Series B (S4–S6) follows the same design but employs a  $\text{CeO}_2$  precursor synthesized in 75 vol.% IPA, allowing direct comparison between low- and high-alcohol media under identical concentration gradients. Series C (S7–S8) includes ex-situ composites produced by mechanical mixing with 10 %  $\text{CeO}_2$  nanoparticles derived from the two precursor environments (25 vol.% and 75 vol.% IPA), providing a reference for distinguishing the influence of synthesis route versus solvent composition.

X-ray diffraction (XRD) patterns of the synthesized electrode material based on Core-shell structure  $\text{MnO}_2@\text{CeO}_2$  are shown in Figure 1. The X-ray diffraction patterns of samples S2–S8 show the characteristic reflections of tetragonal  $\alpha\text{-MnO}_2$ , with all major peaks matching the reference pattern (ICSD #20227). The diffractograms exhibit no additional crystalline phases, indicating that the  $\text{MnO}_2$



**Fig. 1.** XRD Patterns core-shell nanocomposites  $\alpha\text{-MnO}_2@\text{CeO}_2$  (S1–S8)

framework remains structurally preserved across all composite formulations. Minor variations in peak intensity and broadening among the samples reflect differences in crystallite size, defect density, and the degree of structural distortion induced by CeO<sub>2</sub> incorporation. These trends collectively confirm that Ce-based modification affects the microstructural ordering of  $\alpha$ -MnO<sub>2</sub> without altering its primary crystal structure.

The study demonstrates that controlled variation of CeO<sub>2</sub> precursor composition and synthesis route enables systematic tuning of the  $\alpha$ -MnO<sub>2</sub>@CeO<sub>2</sub> nanocomposites. Structural analysis confirms preservation of the  $\alpha$ -MnO<sub>2</sub> framework, while Ce-based modification induces measurable microstructural changes without generating secondary crystalline phases. The combined results highlight the effectiveness of precursor engineering in tailoring mixed-oxide architectures for advanced electrochemical applications.

1. Shlapa Y. *et al.* Cerium dioxide nanoparticles synthesized via precipitation at constant pH: Synthesis, physical-chemical and antioxidant properties //Colloids and Surfaces B: Biointerfaces. – 2022. – T. 220. – C. 112960.

2. Shlapa Y. *et al.* Design of magnetic Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/CeO<sub>2</sub> “core/shell”-like nanocomposites with pronounced antiamyloidogenic and antioxidant bioactivity //ACS Applied Materials & Interfaces. – 2023. – T. 15. – №. 42. – C. 49346-49361.

**Funding:** This work was funded by the NATO Partnerships and Cooperative Security Committee in the framework of the Science for Peace and Security Programme (G6166).

## Конфокальна мікро-раманівська спектроскопія просторового розподілу деформацій та концентрації домішки бору поблизу дислокацій у легованому бором НРНТ-алмазі

І. М. Даниленко<sup>1</sup>, П. М. Литвин<sup>1</sup>, А.С. Ніколенко<sup>1</sup>, В.В. Стрельчук<sup>1</sup>,  
Т.В. Коваленко<sup>2</sup>, В.В. Лисаковський<sup>2</sup>, С.О. Івахненко<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України,  
пр. Науки, 41, Київ 03028, Україна  
E-mail: igor.tesV@gmail.com

<sup>2</sup> Інститут надтвердих матеріалів ім. Бакуля НАН України,  
вул. Автозаводська, 2, Київ 04074, Україна

Легований бором алмаз, вирощений методом температурного градієнта в умовах високого тиску та високої температури (НРНТ), є перспективним широкозонним напівпровідниковим матеріалом для приладів силової електроніки, зокрема діодів Шотткі. Водночас відтворюваність їхніх електрофізичних параметрів істотно обмежується наявністю електрично активних локальних дефектів, насамперед проростаючих дислокацій, які можуть спричиняти підвищені зворотні струми витоку, погіршення випрямних характеристик і передчасний електричний пробій. Так звані «дефекти-кілери», які часто пов'язують із дислокаціями або індукованими дефектами поверхневими неоднорідностями, істотно впливають на транспортні характеристики та вихід придатних діодів Шотткі на основі алмазу. У зв'язку з цим особливого значення набувають неруйнівні спектроскопічні методи, здатні виявляти та кількісно характеризувати дислокаційно-індуковані структурні й домішкові неоднорідності.

В даній роботі з використанням конфокальної мікро-раманівської спектроскопії досліджено просторовий розподіл механічних напружень та концентрації некомпенсованої домішки бору в околі одиночних дислокацій на природній ростовій грані (111) легованого бором НРНТ-алмазу. Оцінку величини деформацій проведено за частотним зсувом  $F_{2g}$  смуги алмазу при  $1332\text{ см}^{-1}$ , а концентрацію некомпенсованого бору - за відносною інтенсивністю індукованої бором смуги біля  $588\text{ см}^{-1}$ . Для кількісної інтерпретації цих даних використано незалежне калібрування за результатами скануючої інфрачервоної (ІЧ) мікро-спектроскопії на пластинах алмазу, де концентрацію некомпенсованих акцепторів бору  $[N_A - N_D]$  визначено за інтенсивністю характеристичних смуг домішкового поглинання бору при 2800, 2450, та  $1290\text{ см}^{-1}$ .

Встановлено, що одиничні виходи дислокацій на ростову грань (111) формують локальні знакозмінні поля механічних напружень з характерною усередненою амплітудою близько  $\pm 80\text{ МПа}$  (рис. 1а) та супроводжуються просторовим перерозподілом некомпенсованого бору (рис. 1б); при цьому області збагачення і збіднення домішкою орієнтовані приблизно

перпендикулярно до осі раманівського диполя напружень, що свідчить про визначальну роль повного пружного поля дислокації у процесах сегрегації бору.

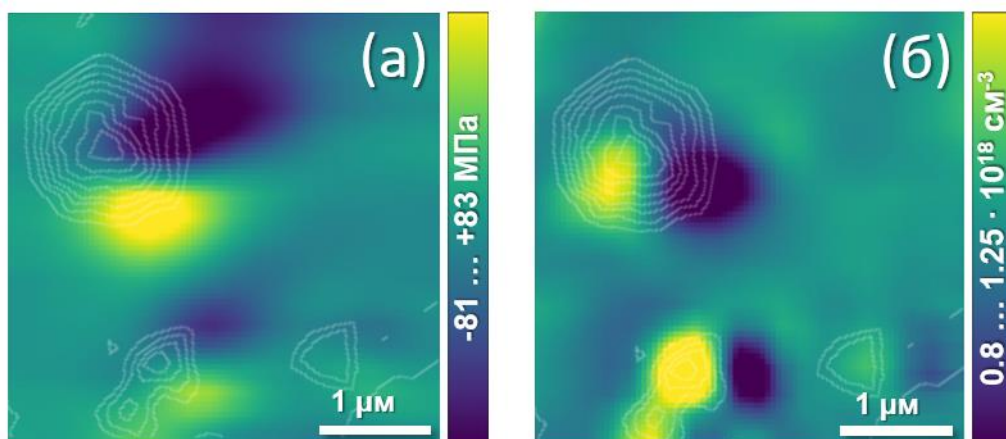


Рис. 1. (а) Просторовий розподіл деформацій, визначений за частотним положенням раманівської  $F_{2g}$ -смуги алмазу при  $1332\text{ см}^{-1}$ , та (б) концентрації некомпенсованої домішки бору  $[N_A - N_D]$ , оціненої за відношенням  $I_{588}/I_{1332}$ , за даними мікро-раманівської спектроскопії. Ізолініями показано АСМ карту висот з загальним перепадом  $50\text{ нм}$  в околі дислокаційних ямок травлення за даними скорельованих нанозондових вимірювань.

Отримані результати добре узгожуються із результатами Кельвін-зондової мікроскопії (KPFM) та провідної мікроскопії опору розтікання (SSRM), які показали позитивний контраст контактної різниці потенціалів  $35\text{--}50\text{ мВ}$  та істотне зниження локального опору на кілька порядків в околі дислокаційних ямок травлення. Це підтверджує, що виявлені методом конфокальної мікро-раманівської спектроскопії неоднорідності розподілу деформацій і легуючої домішки поблизу дислокацій безпосередньо проявляються в локальних електронних властивостях алмазу, та потенційно можуть виступати «дефектами-кілерами» у діодах Шотткі на основі алмазу.

Таким чином, конфокальна мікро-раманівська спектроскопія є ефективним неруйнівним методом діагностики дислокаційно-індукованих неоднорідностей у легovanому бором НРНТ-алмазі, а контроль його дефектно-домішкового стану є важливою передумовою оптимізації параметрів алмазних діодних структур.

Робота виконана за підтримки НФДУ, проєкт № 2025.07/0197 “Закономірності НРНТ-кристалізації та фізичні механізми формування електронних властивостей монокристалів алмазу, легованих бором і азотом з граничними концентраціями”.

## **Вплив режимів термічних обробок на структурні та оптичні характеристики порошків та кераміки діоксиду цирконію, легованого манганом**

К.О. Козоріз, Л.Ю. Хоменкова, Т. Стара, О. Ісаєва, І. Ворона, Л.В. Борковська

*Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, пр. Науки, 41,  
Київ 03028, Україна  
[kozoriz.kostiantin@gmail.com](mailto:kozoriz.kostiantin@gmail.com)*

Діоксид цирконію ( $ZrO_2$ ) належить до класу функціональних матеріалів з високою термостійкістю, механічною міцністю та хімічною стабільністю, що зумовлює його широке застосування в кераміці, каталізі та сенсориці. Актуальною задачею є керування фазовим складом та дефектною системою  $ZrO_2$  шляхом введення субвалентних домішок. Останні дозволяють стабілізувати тетрагональну та кубічну фази при кімнатній температурі за рахунок формування додаткових кисневих вакансій, а також сприяти утворенню нових оптичних центрів в об'ємі зерен, а також комплексів на їх поверхні [1,2].

Серед різних перехідних металів, манган є перспективною домішкою, оскільки може існувати у кількох валентних станах ( $Mn^{2+}$ ,  $Mn^{3+}$ ,  $Mn^{4+}$ ) і має значно кращу розчинність у матриці  $ZrO_2$  (до 15 мол. %). Іон  $Mn^{2+}$  має радіус, близький до радіусу  $Zr^{4+}$ , а сильніші зв'язки Mn-O забезпечують стабілізацію тетрагональної та ромбоєдричної фаз, сприяють утриманню домішки в об'ємі зерен та відсутності сегрегації за високих температур. Це робить легування манганом ефективним інструментом контрольованої модифікації структури та оптичних характеристик  $ZrO_2$ . Метою роботи є дослідження впливу вмісту мангану та умов термічної обробки на структурні та оптичні характеристики порошків і кераміки на основі  $ZrO_2$ .

Порошки Mn- $ZrO_2$  було отримано методами сумісного осадження з послідовним відпалом на повітрі за температур 400-1000 °C протягом 2 годин. Вміст мангану варіювався в діапазоні  $[Mn]=1 \times 10^{19} - 5 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$ . Керамічні зразки було отримано спіканням пресованих порошків за температур 1100-1500 °C на повітрі протягом 3 годин. Після відпалу зразки охолоджувалися до кімнатної температури разом з піччю. Оптичні характеристики та фазовий склад досліджували методами дифузного відбивання світла, комбінаційного розсіювання світла (КРС) та електронного парамагнітного резонансу (ЕПР).

Аналіз спектрів оптичного поглинання порошків та кераміки  $ZrO_2$  та Mn- $ZrO_2$  виявив, що легування манганом сприяє зростанню за амплітудою смуги поглинання в області 280-340 нм, пов'язаної з кисневими вакансіями. Разом з цим, в області 450-800 нм з'являється сигнал, асоційований з домішкою Mn. Зі збільшенням вмісту Mn внесок цього сигналу зростає, а положення максимуму зсувається від 590 до 630 нм і супроводжується уширенням. Така поведінка спектрів оптичного поглинання зумовлена заміщенням катіонів  $Zr^{4+}$  іонами мангану та утворенням дефектів  $Mn_{Zr}^{2+}$ . Це підтверджується результатами досліджень зразків методом ЕПР. Дійсно, для всіх порошків Mn- $ZrO_2$  виявлено присутність ЕПР центрів  $Mn_{Zr}^{2+}$  [3], сигнал від яких найкраще проявляється у зразках із вмістом мангану  $[Mn]=1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ .

Сpektри КРС порошків  $ZrO_2$  та Mn- $ZrO_2$  з вмістом  $[Mn]=1 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , відпалених при 400-600 °C, вказують на присутність тетрагональної та моноклінної фаз, для яких

характерні фониони реєструються при  $143\text{ см}^{-1}$  і  $264\text{ см}^{-1}$  ( $t\text{-ZrO}_2$ ) та при  $750\text{-}760\text{ см}^{-1}$  ( $m\text{-ZrO}_2$ ), відповідно [4]. Збільшення вмісту мангану до  $[\text{Mn}]=1\times 10^{20}\text{ см}^{-3}$  призводить до уширення фонових смуг і зростання внеску тетрагональної фази, а при подальшому його збільшенні тетрагональна структура домінує. В той же час, відпал при  $800\text{-}1000\text{ }^\circ\text{C}$  сприяє формуванню переважно моноклінної структури, не зважаючи на значний вміст мангану  $[\text{Mn}]=1\text{-}5\times 10^{21}\text{ см}^{-3}$ . При цьому, утворення додаткових фаз, пов'язаних з манганом, зокрема оксидів мангану, у досліджених зразках не виявлено.

Таку структурну поведінку порошків  $\text{Mn-ZrO}_2$  можна пояснити конкуренцією процесів дифузії Mn в об'єм зерен  $\text{ZrO}_2$  та зростанням зерен за розмірами. Для малих зерен, крім домішки Mn, яка сприяє утворенню кисневих вакансій, додаткова стабілізація тетрагональної структури відбувається за рахунок поверхневої енергії зерен. В той же час, для великих зерен, утворення яких має місце при підвищених температурах, відношення об'єму зерна до площі його поверхні зростає суттєво, внесок поверхневої енергії зменшується і головну роль у стабілізації структури грає вміст домішки, якого виявляється недостатньо, щоб запобігти трансформації тетрагональної структури у моноклінну. Це припущення може пояснити і подібну структуру керамічних зразків, відпалених при  $1200\text{-}1500\text{ }^\circ\text{C}$ .

Встановлено, що при повільному нагріванні ( $3\text{ }^\circ\text{C/хв}$ ) пресованих зразків до температури спікання формується суцільна кераміка, а при швидкому ( $30\text{ }^\circ\text{C/хв}$ ) формується порувата кераміка, яка може бути використана для анодів керамічних паливних комірок та каталізу.

Таким чином, отримані результати демонструють, що легування манганом та термічна обробка відіграють ключову роль у структурній перебудові матриці  $\text{ZrO}_2$  та модифікації оптичних характеристик. Це створює підґрунтя для розробки матеріалів на основі оксиду цирконію, легованого манганом, для функціональних застосувань, включно з каталізом, сенсорними системами та керамічними електролітами.

Автори висловлюють подяку НАН України за підтримку у проведенні досліджень (тема № III-10-24 «Створення базових технологій формування напівпровідникових матеріалів і структур для нано- та оптоелектроніки», проєкт «Новітні матеріали та функціональні компоненти для альтернативних джерел енергії» (рег. № 0125U000995)). Козоріз К.О. висловлює подяку за стипендію Президента України для молодих вчених.

1. Korsunskaya N., Khomenkova L. Multifunctional zirconia-based nanocomposites // Solid State Composites and Hybrid Systems: Fundamentals and Applications, CRC Press, Boca Raton, FL, USA.-2018.-P. 28-57.
2. Marie O., Portier X., Korsunskaya N., Khomenkova L. CO-PROX reactions on copper  $\text{Y}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$  catalysts prepared by a single step co-precipitation technique // Appl. Catal. B: Environ.-2020.-278.-P.119258.
3. Nosenko V.V., Vorona I.P., Khomenkova L.Yu., Petrenko T.L., Yukhymchuk V.O., Borkovska L.V., Povarchuk V.Yu., Trachevsky V.V. Intrinsic and radiation defects in  $\text{ZrO}_2$  powders: EPR study // Radiation Phys. Chem.-2026.-**244**.-P.113839
4. Khomenkova L., Marchylo O., Polishchuk Yu., Ponomaryov S., Isaieva O., Vorona I., Melnichuk L., Portier X., Melnichuk O., Korsunskaya N. Effect of dopant loading and calcination conditions on structural and optical properties of  $\text{ZrO}_2$  nanopowders doped with copper and yttrium // Mater. Res. Express.-2024.-**11**,N.6.-P.065005.

## Charge-fluid heating in quasi-ballistic plasmonic FETs

V

<sup>1</sup>*Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv 03028, Ukraine; mykola.eliseev@gmail.com*

<sup>2</sup>*Institute of High-Pressure Physics, Polish Academy of Sciences, Warsaw 01-142, Poland*

During the last decades, electron energy gain/dissipation and overall thermal budget in nanoscale structures have been studied in many papers (see, for example, [1] and references therein) with the focus on commonly used small sized field effect transistors (FETs) [2]. To study the thermal effects on nanoscale, micro- and nanoscale scanning thermometry methods have been developed (see, for example, [3, 4]).

W

e

h

a

Let us consider a static Euler equation with a constant current, but with the simplest form of pressure considered, given by expr. (1c):

e

s

t

u

Let us introduce the following dimensionless terms:

i

e

In

t

h

e

In quasi-ballistic plasmonic FETs, where inelastic electron scattering is negligible, an elastic scattering provides the specific mechanism of electron fluid heating: the energy losses during deceleration of the flux are distributed over chaotic degrees of freedom. This mechanism, and fluid dynamics, both determine the behavior of the electron temperature along the FET channel and highly nonlocal character of heat generation and transport. We suggest that the presented results on the thermal effects can be used for elaboration of plasmonic FETs, and they can be important for their appropriate applications.

l

e

f

f

e

c

t

s

l

e

f

f

e

c

t

s

l

i

n

q

u

a

s

i

### Problem statement and the results

2

a

n

d

M. Yeliseiev<sup>1, a</sup>

2

a

n

d

2

a

n

d

2

a

n

d

2

a

n

d

2

a

n

d

2

a

n

d

2

a

n

d

2

a

n

d

2

$$\frac{u}{\tau} + u \frac{du}{dx} = -\frac{e^2 \hbar}{m \varepsilon \varepsilon_0} \frac{dn}{dx} - \frac{1}{mn} \frac{dp}{dx} \quad (1a)$$

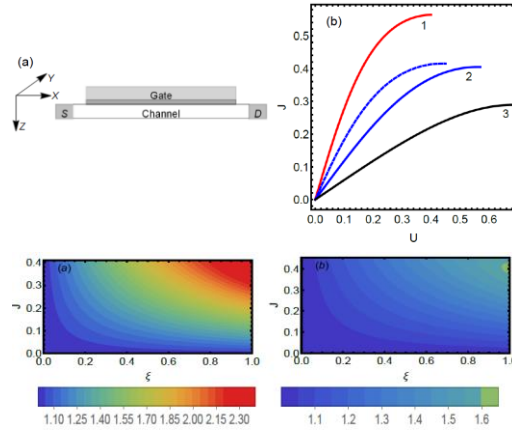
$$u \frac{d\theta}{dx} + \theta \frac{du}{dx} = \frac{mu^2}{c_v k_B \tau} \quad (1b)$$

$$u = \frac{j}{n}, p = n k_B \theta \quad (1c)$$

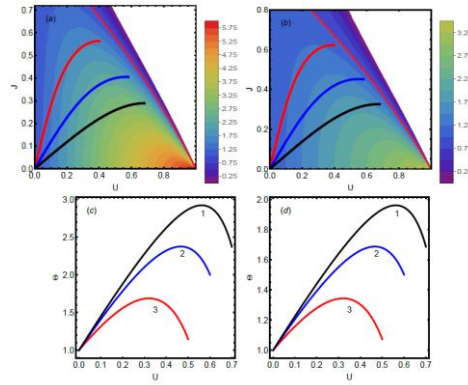
$$V = \frac{u}{v_s}, N = \frac{n}{n_s}, \xi = \frac{x}{L}, J = \frac{j}{j_0}, \Theta = \frac{\theta}{T_s}, J = \frac{j}{j_{sc}}, P = \frac{p}{m v_p^2 n_s}, S = \frac{k_B T_s}{m v_p^2} \quad (2)$$

$$\xi = \frac{(1-N)(J^2(N-3)+2N+4NS)}{4NJ\mathcal{B}} \quad (3a)$$

$$\Theta = \left( S - J\mathcal{B}\xi - \frac{N^2-1}{2} - J^2 \frac{1-N}{N} \right) \frac{1}{SN} \quad (3b)$$



**Fig. 1.** The device we considered (a). J-U characteristics at  $S = 0.1$  for  $B = 0.2$  (curve 1,  $J_c = 0.56, U_c = 0.54$ ),  $B = 0.5$  (curve 2,  $J_c = 0.35, U_c = 0.58$ ),  $B = 1$  (curve 3,  $J_c = 0.29, U_c = 0.68$ ). Dashed curve is for  $B = 0.5$  in the model form the work [5] with  $S = 0$  (b). (b). Density plots of  $\Theta(\xi, J)$  for  $B = 0.5$  at  $S=0.1$  (c) and  $S=0.2$  (d). Note that the temperature scales are different from those in Fig. 2



**Fig. 2** Density plots of  $\Theta(U, J)$  for  $S = 0.1$  (a) and  $S = 0.2$  (b). Color parts of the panels are for  $\Theta > 0$ . The blank parts show the region where a physically-feasible solution ceases to exist. The dashed lines correspond to  $\Theta(U, J) = 1$ . Full lines are  $J(U)$  dependencies, as in Fig. 2, separating the areas attainable for the solutions at  $B = 0.2, 0.5, 1$ . (c) and (d):  $\Theta(U, J_c)$  at the three values of  $B$  for  $S = 0.1, 0.2$ , respectively. Note that the scales on the vertical axes are different.

## Вплив додаткового легування $\text{TiO}_2$ на червону люмінесценцію іону $\text{Mn}^{4+}$ в алюмінаті магнію

К.О. Козоріз<sup>1</sup>, І.П. Ворона<sup>1</sup>, О.Й. Гудименко<sup>1</sup>, Л.В. Борковська<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, пр. Науки, 41, Київ 03028, Україна  
[kozoriz.kostiantin@gmail.com](mailto:kozoriz.kostiantin@gmail.com)

Червоні люмінофори відіграють ключову роль у технології світлодіодного освітлення, трансформуючи синє випромінювання діодного чипа у червоне. У складі білих світлодіодів вони забезпечують комфортну «теплу» температуру світла для інтер'єрів, а у спеціалізованих фітолампах активують критичні біологічні процеси у рослин - від фотосинтезу до цвітіння. Кристалічні сполуки, активовані іоном  $\text{Mn}^{4+}$ , при збудженні УФ або синє-зеленим світлом генерують випромінювання в діапазоні від 620 нм до 723 нм, що відповідає спектральним вимогам до червоного люмінофора для застосування в світлодіодних освітлювачах. Оксидні матриці, активовані іоном  $\text{Mn}^{4+}$ , вирізняються високою термічною та вологостійкістю, екологічністю та низькою собівартістю. Зокрема, у шпінелі  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  смуга випромінювання іону  $\text{Mn}^{4+}$  має пік на 651 нм, що є одним із найкращих показників серед оксидних матриць для створення білих світлодіодів. Хоча цей люмінофор можна синтезувати твердофазним методом, процес потребує високих температур та додаткових заходів для підвищення світлової ефективності через необхідність компенсації заряду при заміщенні  $\text{Al}^{3+}$  на  $\text{Mn}^{4+}$ .

В роботі представлені результати досліджень впливу додавання  $\text{TiO}_2$  на процеси спікання, оптичні та структурні властивості люмінесцентної кераміки  $\text{MgAl}_2\text{O}_4:\text{Mn}$  з метою підвищення інтенсивності червоної фотолюмінесценції (ФЛ) іону  $\text{Mn}^{4+}$ .

Зразки кераміки  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3$  та  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ , легованої 0,1 %  $\text{Mn}$ , були одержані шляхом спікання при 1100-1400°C на повітрі сумішей порошків відповідних оксидів. Кількість  $\text{TiO}_2$  підбиралась таким чином, щоб кераміка містила однакову кількість атомів  $\text{Ti}$  та  $\text{Al}$ . Характеристики одержаних зразків досліджувались за кімнатної температури.

Аналіз мікроструктури кераміки за допомогою скануючого електронного мікроскопу підтвердив, що додавання  $\text{TiO}_2$  сприяє спіканню зерен та збільшенню їх розміру в 4 рази за всіх температур відпалу. Максимальний розмір зерен становив ~10 мкм у зразку  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ , відпаленому при 1400°C, а мінімальний - декілька сотень нанометрів у  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3$ , відпаленому при 1100°C. Аналіз кривих рентгенівської дифракції показав, що в кераміці  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3$  концентрація шпінелі  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  зростає від 35% до 96% зі збільшенням температури відпалу від 1100°C до 1400°C. В кераміці  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$  виявлено два тверді розчини - один зі структурою кандиліту типу  $\text{Mg}_2\text{TiO}_4$ , а другий зі структурою шпінелі типу  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ . Зі збільшенням температури відпалу концентрація кандиліту зростала від 55% до 67%, а шпінелі зменшувалася від 20% до 10%, постійна ґратки кандиліту зменшувалася від 0,840 до 0,833 нм, а шпінелі зростала від 0,811 до 0,828 нм.

Усі зразки кераміки демонстрували смугу червоної ФЛ, спричинену забороненим за спіном переходом  ${}^2\text{E} \rightarrow {}^4\text{A}_2$  іону  $\text{Mn}^{4+}$ , та дві широкі смуги збудження в УФ та синьо-зеленій областях спектра, зумовлені дозволеними за спіном переходами  ${}^4\text{A}_2 \rightarrow {}^4\text{T}_1$  та  ${}^4\text{A}_2 \rightarrow {}^4\text{T}_2$  іону  $\text{Mn}^{4+}$  (Рис.1а). Додавання  $\text{TiO}_2$  призводило до зсуву смуги червоної ФЛ та смуг її збудження в довгохвильову область спектру. Максимум смуги ФЛ становив 651 нм в зразках  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3$  та 656 нм в зразках  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ , а час релаксації ФЛ складав 932 мкс і 530 мкс, відповідно. Запропоновано, що в кераміці, одержаній з додаванням  $\text{TiO}_2$ , основний внесок у смугу червоної ФЛ дає випромінювання іону  $\text{Mn}^{4+}$  у фазі кандиліту.

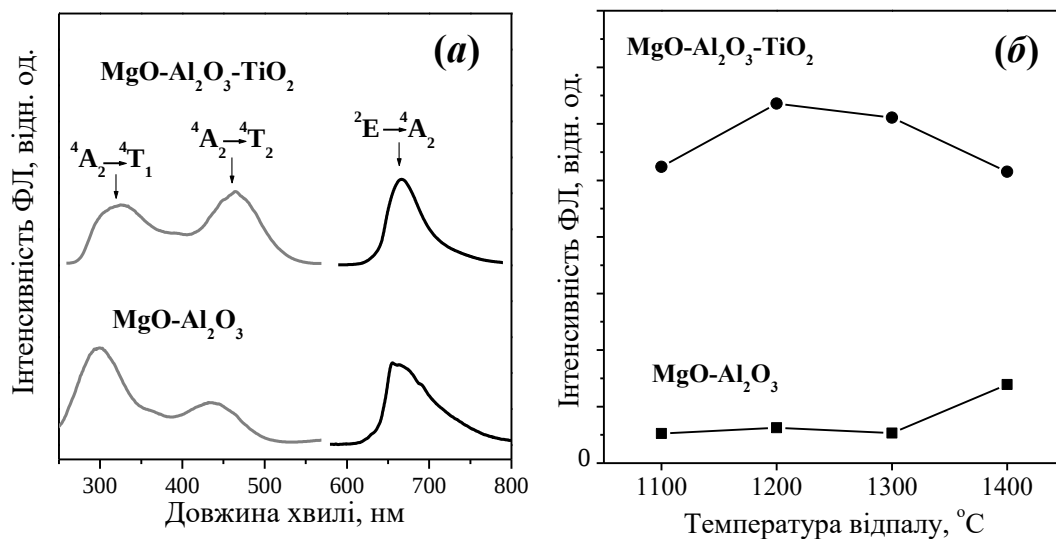


Рис.1. (а) Спектри фотолюмінесценції (справа) та спектри її збудження (зліва) кераміки  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3$  та  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ , відпаленої при  $1400^\circ\text{C}$ ; (б) Інтегральна інтенсивність червоної ФЛ двох типів кераміки в залежності від температури відпалу.

Кераміка, одержана з додаванням  $\text{TiO}_2$ , показала в рази вищу інтенсивність червоної ФЛ, ніж  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3$  за всіх температур відпалу (Рис.1б). Координати СІЕ червоного випромінювання  $\text{Mn}^{4+}$  у люмінофорах двох типів, відпалених при  $1400^\circ\text{C}$ , становили (0,6932, 0,2902) для  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3$  та (0,6953, 0,2894) для  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ .

В той же час, в усіх зразках  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3$  спостерігалась додаткова смуга зеленої ФЛ з максимумом на 520 нм. Цю смугу пов'язують із переходом  $^4\text{T}_1 \rightarrow ^6\text{A}_1$  іонів  $\text{Mn}^{2+}$ , що займають тетраедричні позиції замість вузлових іонів  $\text{Mg}^{2+}$  в шпінелі  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ . Наявність центрів  $\text{Mn}^{2+}$  виключно у зразках  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3$  було підтверджено методом електронного парамагнітного резонансу (ЕПР). Залежність інтенсивності сигналу ЕПР іону  $\text{Mn}^{2+}$  від температури відпалу корелювала з відповідною залежністю інтенсивності зеленої ФЛ.

Таким чином, показано, що додавання  $\text{TiO}_2$  сприяє спіканню кераміки  $\text{MgO-Al}_2\text{O}_3$  і посилює червону люмінесценцію іону  $\text{Mn}^{4+}$ . Встановлено, що в твердому розчині кандиліту  $\text{Mg}_{2-x}\text{Ti}_{1-x}\text{Al}_2\text{O}_4$  марганець переважно набуває зарядового стану +4. Це робить дану фазу перспективнішою основою для червоних люмінофорів порівняно зі шпінеллю  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ .

## Структурні дослідження халькогенідних напівпровідникових стекол складів $(\text{AsSe})_{100-x} \text{Ag}_x$

Кочубей Г.<sup>1</sup>, Стронський О.<sup>1</sup>, Кавецький Т.<sup>2</sup>, Balayeva N.<sup>3</sup>, Zahn D.R.T.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарівця НАН України, Київ, Україна

<sup>2</sup> Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, Дрогобич, Україна

<sup>3</sup> Semiconductor Physics and MAIN, Chemnitz University of Technology, Chemnitz, Germany

[kochubei.hanna@gmail.com](mailto:kochubei.hanna@gmail.com)

Халькогенідні стекла системи As-Se є широко вивченими завдяки низці своїх переваг над іншими складами. Це широке вікно пропускання в ІЧ-області, високий показник заломлення і фоточутливість [1]. Відомо, що введення срібла підвищує показник нелінійного заломлення, послаблює фотоокиснення поверхні скла та поліпшує його фізичні властивості, такі як густина та мікротвердість матеріалу [2]. Окрім цього матеріал має досить велику зону склоутворення, що дозволяє доволі сильно підвищувати концентрацію срібла, без втрати аморфного стану [3].

У даній роботі ми провели структурні дослідження серії складів  $(\text{AsSe})_{100-x} \text{Ag}_x$ , де  $x = 0, 5, 10, 15, 20, 25$ . Спочатку склад скла було перевірено за допомогою енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (EDX) з використанням Quantax ESPRIT 1.8.5 на FEI NOVA NanoSEM. Далі були проведені вимірювання рентгенівської дифракції (XRD) за допомогою дифрактометра Rigaku SmartLab у геометрії паралельних пучків з випромінюванням  $\text{Cu K}\alpha$  ( $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$ ). Вимірювання спектрів комбінаційного розсіювання світла проводилися за допомогою спектрометра LabRAM HR (HORIBA Scientific) у геометрії зворотного розсіювання при кімнатній температурі.

Отримані дані дифракції для склоподібної системи  $(\text{AsSe})_{100-x} \text{Ag}_x$  (рис. 1) були використані для розрахунку функцій парного розподілу  $G(r)$ . За положеннями першого та другого максимумів були визначені радіус першої координаційної сфери  $r_1$  та радіус другої координаційної сфери  $r_2$ . Для першої координаційної сфери міжатомна відстань збільшувалася зі зростанням вмісту срібла з  $2,48 \text{ \AA}$  при  $x = 0$  до  $2,62 \text{ \AA}$  при  $x = 25$ . Відповідні значення для другої координаційної сфери змінювалися з  $3,69 \text{ \AA}$  при  $x = 0$  до  $3,83 \text{ \AA}$  при  $x = 25$ . Кут зв'язку  $\varphi$  було розраховано за формулою:  $\varphi = 2 \arcsin (r_2 / 2r_1)$  і він змінився з  $96,14^\circ$  при  $x = 0$  до  $93,93^\circ$  при  $x = 25$ .

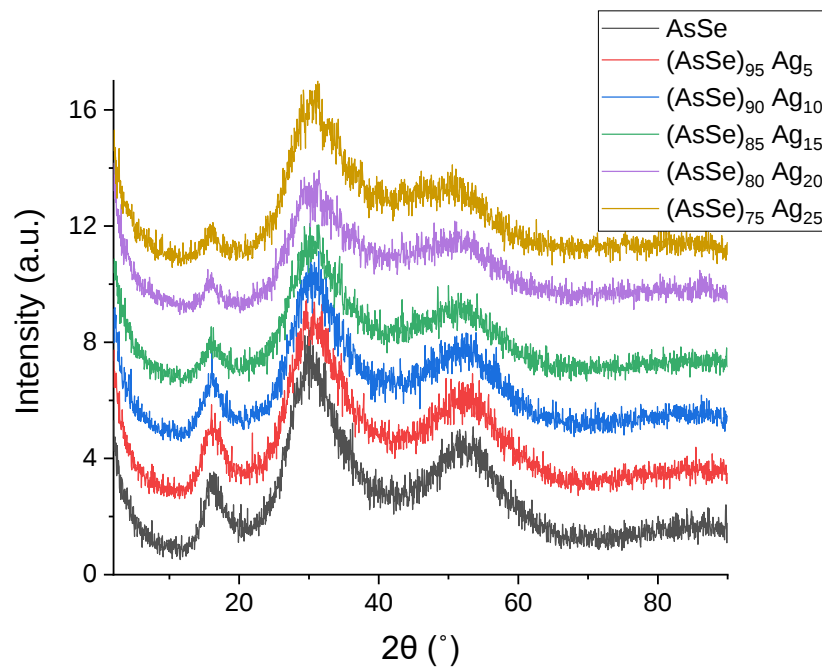


Рис. 1 Дифракційні картини для складів  $(\text{AsSe})_{100-x}\text{Ag}_x$

Збільшення вмісту срібла призводить до поступового збільшення відстаней  $r_1$  і  $r_2$ , що супроводжується зменшенням кута зв'язку  $\varphi$ . Така поведінка свідчить про структурну перебудову склоподібної мережі та деформацію базових пірамідальних одиниць  $\text{AsSe}_3$  внаслідок включення срібла. Спостережувані смуги комбінаційного розсіювання світла досліджуваних зразків As-Se-Ag показують, що такі стекла містять різні нанофази.

*Ця робота частково фінансувалася за рахунок пріоритетної наукової програми НАН України (0125U000799) та Національного фонду наукових досліджень України [номер гранту 2025.07/0124]. Г. Кочубей висловлює подяку за підтримку в рамках проекту DAAD №57703089 «Сталі оптичні матеріали та методи: освітня та дослідницька інфраструктура (SOMMER!)» під час наукового стажування в Технічному університеті Хемніца. \*

1. Стронський О. В., Венгер Є. Ф., Олексенко П. Ф., Мельничук О. В., Халькогенідні склоподібні напівпровідники: властивості та практичні застосування : монографія – Ніжин : НДУ ім. М. Гоголя, 2016. – 236 с. ISBN 978-617-527-148-3
2. Aparimita A., Sripan C., Ganesan R., Naik R., Photo- and thermally induced property change in Ag diffusion into Ag/As<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin films, Applied Physics A (2018) 124:267 <https://doi.org/10.1007/s00339-018-1692-4>
3. Mohamed M., Moustafa S., Morphology, structure and thermal analysis of (As<sub>50</sub>Se<sub>50</sub>)<sub>100-x</sub>Ag<sub>x</sub> glasses, Applied Physics A (2020) 126:270 <https://doi.org/10.1007/s00339-020-3457-0>

## Morphology control of porous silicon matrices modified by electrochemical and chemical treatment

M. Kravchun<sup>1</sup>, V. Shevchenko<sup>2</sup>, P. Teselko<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Faculty of Physics, Taras Shevchenko National University of Kyiv, 2/1 Academician Glushkov Ave., Kyiv 03022, Ukraine  
[krav.m.2002@gmail.com](mailto:krav.m.2002@gmail.com)*

Porous silicon matrices are promising for the study of substances in pores and the synthesis of nanostructured materials or composites due to their morphology, physical and chemical properties. The high specific surface area and the variety of pore volume, shape and size allow the use of porous Si matrices for the development of sensors [1]. Depending on the application, the requirements for pore morphology may be different. Matrices with optimal pore morphology can be produced directly by electrochemical etching of silicon [2] or by additional treatments. In this work, we study how the composition of the electrolyte during the electrochemical etching of porous Si and the combination of thermal and chemical treatments affects the morphology of the pores.

Porous Si matrices were prepared by electrochemical etching of n-type Si substrates with resistivity 0.01-0.02 Ohm\*cm in an electrolyte based on a 48% water solution of (1:1) HF and C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH without (type I) or with (type II) the addition of hydrogen peroxide. The samples were synthesized at etching current density of 30-300 mA\*cm<sup>-2</sup>. Samples of type I (S1, S2, C) were thermally annealed at different temperatures and treated in solution of hydrofluoric acid. The microstructure of porous Si was evaluated by Raman spectroscopy. The morphology of pores, in particular their shape and size, was studied using scanning electron microscopy.

The evolution of the morphology of porous silicon from the initial fine-porous structure to the developed macroporous matrix was studied using SEM imaging of Type I samples. Sample S0 (type I) is the untreated one and has the initial structure. Sample S2, which was processed at 700°C, acquired pronounced roughness with the formation of rounded and well-defined pores with a diameter of 50–60 nm. Sample S1 underwent the biggest changes by being subjected to two cycles of thermal oxidation, which led to a significant reduction in the thickness of the silicon walls and an increase in porosity up to 85% with a wide distribution of pore sizes.

Fig. 1 shows examples of Raman spectra. They are characterised by a red shift and broadening of the main peak relative to 520 cm<sup>-1</sup> for c-Si, which is caused by the quantum confinement of phonons in the crystallites. The experimental curves were approximated according to the specified model [3]. The model takes into account the Gaussian distribution of crystallite sizes, which explains the asymmetry of the profile and the occurrence of a low-frequency "tail". Approximation of the data by a theoretical curve made it possible to accurately determine the average size (L) and dispersion (σ) of nanoparticles.

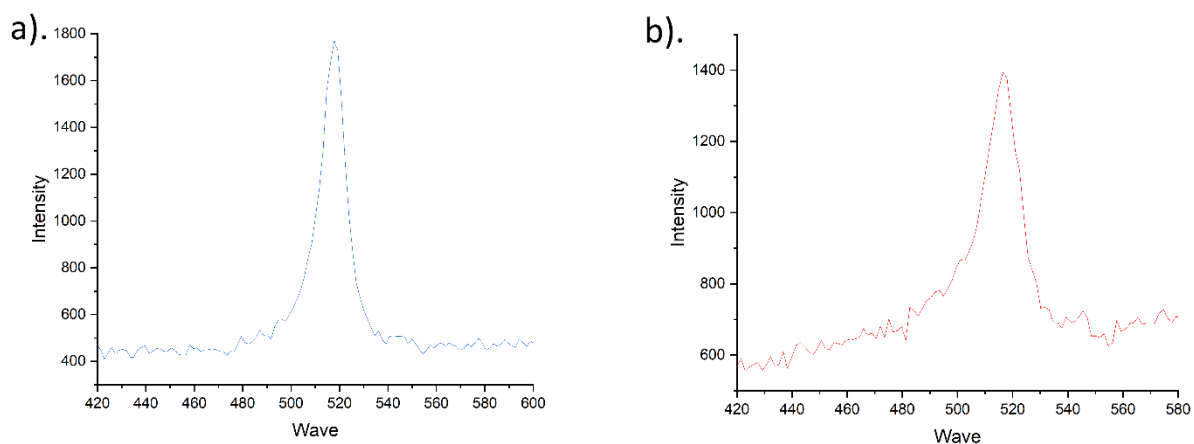


Fig. 1 Examples of Raman spectra for samples: a) S2; b). type II

Table 1. The average crystallite sizes and dispersion.

| Sample        | S0    | S1    | S2   | C    | Type II |
|---------------|-------|-------|------|------|---------|
| L, nm         | 13.08 | 10.62 | 6.37 | 7.62 | 6.75    |
| $\sigma$ , nm | 2.77  | 1.82  | 1.17 | 1.72 | 1.46    |

The analysis has shown that the average crystallite size (L) for all samples is within the range of 6–13 nm. Considerable variability is observed in samples of Type 1. Sample S0 has the largest crystallites and the widest distribution, while S2 shows the smallest size values and the highest homogeneity. Type 2 sample has smaller crystallite sizes and moderate dispersion.

Combined post-anodic treatments of porous Si type I led to an increase in the pore diameter from 10 to 60 nm at annealing temperatures above 700°C. However, the pore size was not uniform. The use of hydrogen peroxide as an oxidizing agent in the electrolyte allowed controlling the morphology and pore size of porous Si type II. The pore diameter ranged from 10 to 60 nm depending on the current density, the pore size distribution was narrow, and the porosity could reach 90%. The application of high current densities (over 200 mA/cm<sup>2</sup>) resulted in the formation of a smooth pore surface. In this case, the thickness of the pore walls decreases, while the specific surface area remains high. Such matrices combine the advantages of a high surface area and pore shape, which ensure easy filtration of materials into the pores.

1. Vercauteren R., Leprince A., Nuytten M., Mahillon J., Francis L. A. Indirect Detection of Bacteria on Optically Enhanced Porous Silicon Membrane-Based Biosensors Using Selective Lytic Enzymes // ACS Sensors.-2023.-8, N 7.-P. 2627-2634.
2. Roland A., Dupuy A., Machon D., Cunin F., Louvain N., Fraisse B., Boucherif A., Monconduit L. In-depth study of annealed porous silicon: Understand the morphological properties effect on negative LiB electrode performance // Electrochimica Acta.-2019.-323.-P. 134758.
3. Islam M. N., Pradhan A., Kumar S. Effects of crystallite size distribution on the Raman-scattering profiles of silicon nanostructures // J. Appl. Phys.-2005.-98, N 2.-P. 024309.

# Вплив розмірного неупорядкування на мінізонну структуру одновимірних ланцюжків сферичних квантових точок у наближенні сильного зв'язку

М. А. Регей, Р. Я. Лешко

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра  
фізики та інформаційних систем  
вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, Львівська обл., 82100  
[mariyaregey@gmail.com](mailto:mariyaregey@gmail.com)*

Дослідження електронних властивостей одновимірних ланцюжків квантових точок (КТ) є актуальним завданням сучасної фізики наноструктур, оскільки такі системи є базовими елементами для пристроїв наноелектроніки та квантових обчислень. У реальних технологічних процесах синтезу нанооб'єктів неминуче виникають флуктуації їхніх геометричних параметрів, що порушує ідеальну періодичність потенціалу. Дана робота присвячена теоретичному опису впливу варіації розмірів сферичних КТ на формування їхньої енергетичної мінізонної структури.

У роботі розроблено теоретичну модель для опису електронної мінізонної структури в одновимірних ланцюжках сферичних КТ за наявності структурного неупорядкування, зумовленого флуктуаціями їхніх радіусів. У даному дослідженні зафіксовано період ґратки, а основну увагу зосереджено на варіації власних енергетичних рівнів кожної точки. Розрахунки проведено в межах методу сильного зв'язку в наближенні найближчих сусідів, що дозволило врахувати стохастичну зміну діагональних елементів гамільтоніана, які в наноструктурах виявляють сильну залежність від геометричних параметрів потенціальної ями.

Досліджено вплив дисперсії розмірів на параметри перенормування інтегралів перескоку та енергетичного зсуву шляхом усереднення за ансамблем над вузьким гаусовим розподілом радіусів. Встановлено, що розкид розмірів призводить до ефективного розширення енергетичних мінізон та розмиття їхніх країв. Це пояснюється тим, що енергія локалізованого стану в КТ є чутливою до відхилень радіуса, що спричиняє значне неупорядкування в системі.

Проаналізовано умови делокалізації електронних станів та визначено межі застосовності моделі ефективного середовища для ланцюжків із різними розмірами часток. Виявлено, що при досягненні критичних значень флуктуацій радіуса довжина локалізації Андерсона стрімко скорочується, що призводить до трансформації зонного спектра у набір локалізованих станів.

У результаті проведеного дослідження в межах методу сильного зв'язку встановлено, що структурне неупорядкування, зумовлене флуктуаціями радіусів КТ, відіграє визначальну роль у формуванні мінізон. Розрахунки показують, що навіть незначне відхилення розмірів призводить до ефективного розширення мінізон та появи хвостів густини станів у забороненій зоні. Отримані дані вказують на те, що для збереження стабільних транспортних властивостей напівпровідникових наноланцюжків важливим є забезпечення високого ступеня монодисперсності КТ під час їхнього виготовлення.

## Вплив параметрів хімічного зв'язку на фазову стабільність та антидифузійні властивості покриттів

М. М. КРЕЧУН<sup>1, 2</sup>, О. М. МАНИК<sup>1, 2</sup>

1. Інститут термоелектрики НАН України та МОН України, вул. Науки, 1, Чернівці, 58000, Україна

2. Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58002, Україна, [krechun.mariia@chnu.edu.ua](mailto:krechun.mariia@chnu.edu.ua)

Підвищення термічної та структурної стабільності контактних і бар'єрних шарів є ключовою проблемою термоелектричних модулів на основі телуриду вісмуту, оскільки міжфазна дифузія спричиняє деградацію контактів, зростання опору та утворення небажаних вторинних фаз [1]. Ефективним рішенням є застосування багатшарових антидифузійних покриттів на основі перехідних металів [2]. Особливу увагу привертає система Fe–Ni–Cr–W, яка поєднує високу термічну стабільність, технологічну сумісність і здатність формувати ефективні дифузійні бар'єри, однак механізми її фазової стабілізації залишаються недостатньо дослідженими.

Метою роботи є теоретичний аналіз міжатомної взаємодії в системі Fe–Ni–Cr–W та встановлення її зв'язку з ефективністю антидифузійних шарів і фазовими перетвореннями на міжфазних межах. На рис. 1 та 2 наведено залежності ефективних зарядів і енергії дисоціації від міжатомної віддалі, отримані за результатами розрахунків [3].

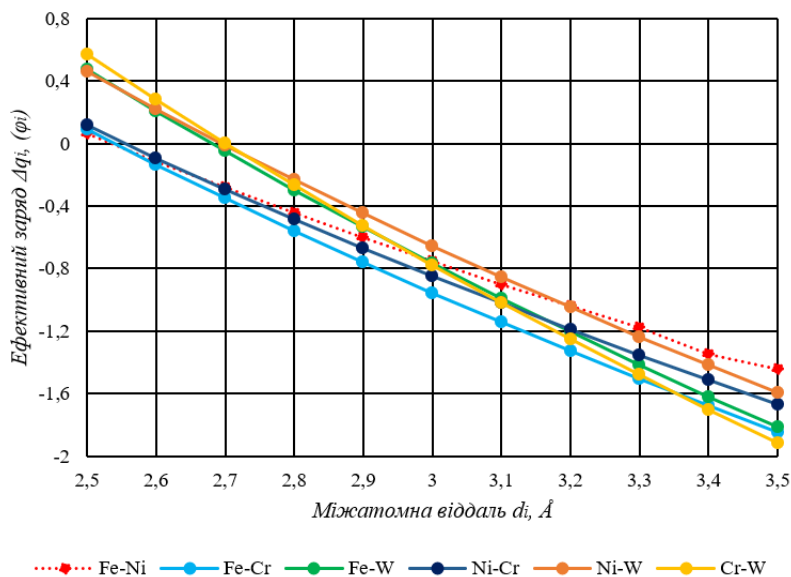


Рис. 1. Залежність ефективних зарядів  $\Delta q_i$  у парах Fe–Ni, Fe–Cr, Fe–W, Ni–Cr, Ni–W, Cr–W від міжатомних віддалей  $d_i$ .

З рисунка 1 видно, що для всіх досліджених бінарних пар спостерігається монотонне зменшення ефективних зарядів зі збільшенням міжатомної віддалі, що відображає поступове послаблення електронної взаємодії між атомами. Різне

положення кривих свідчить про відмінності у ступені електронного перерозподілу для окремих пар, зокрема більш виражену поляризацію у системах з участю W.

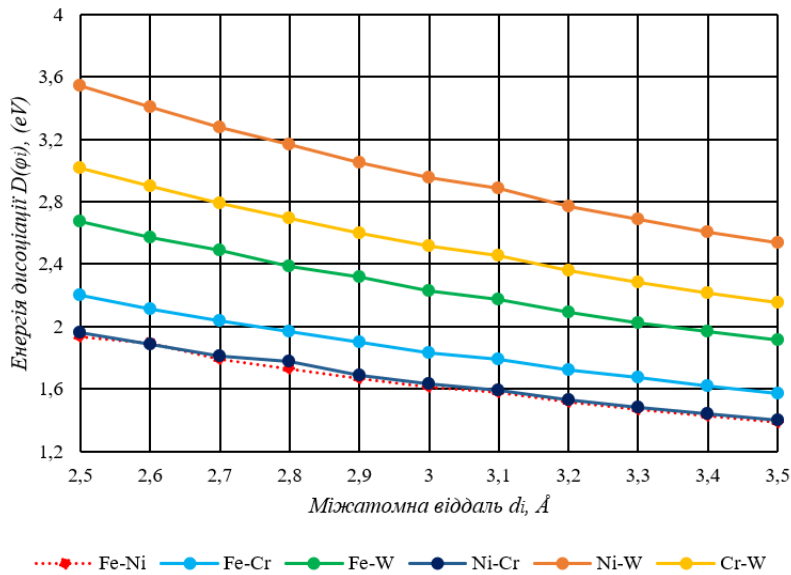


Рис. 2. Залежність енергії дисоціації  $D(\varphi_i)$  у парах Fe–Ni, Fe–Cr, Fe–W, Ni–Cr, Ni–W, Cr–W від міжатомних віддалей  $d_i$ .

З рисунка 2 встановлено, що для всіх досліджених бінарних систем енергія дисоціації закономірно зменшується зі збільшенням міжатомної віддалі, що відповідає послабленню міжатомного зв'язку. Порівняльний аналіз показує, що найбільші значення енергії дисоціації характерні для пар за участю W, тоді як системи Fe–Ni та Ni–Cr характеризуються відносно меншими значеннями. Це свідчить про підвищену стабільність зв'язків у W-вмісних підсистемах та їх потенційну бар'єрну функцію у багатокомпонентних покриттях.

Отримані результати будуть використані для обґрунтування вибору складу антидифузійних покриттів з підвищеною термічною стабільністю. Це забезпечує зниження інтенсивності дифузійних процесів і підвищення довговічності термоелектричних модулів.

1. Vikhor L. M. Modeling of thermoelectric converter characteristics: Lecture at the Summer Thermoelectric School, June 30, 2024, Krakow, Poland // Journal of Thermoelectricity.-2024.-3.-P. 5-22.
2. Krechun M. M., Manyk O. M., Razinkov V. V. Study of Fe–W–Cr and Ni–Cr–W Systems for the Development of High-Quality Anti-Diffusion Coatings // Journal of Thermoelectricity.-2025.-4. -P. 76-81.
3. Krechun M., Manyk O. Correlation models of anti-diffusion and connecting structures in thermoelectric energy converters // Proceedings of SPIE – The International Society for Optical Engineering. Seventeenth International Conference on Correlation Optics.-2025.-**13813**.

## Електролітичний метод отримання синтетичного магнетиту

М.В. Мороз<sup>1</sup>, Б.Д. Нечипорук<sup>2</sup>, В.О. Мислінчук<sup>2</sup>,  
А.В. Лисиця<sup>2</sup>, Б.П. Рудик<sup>1</sup>, Б.А. Татарин<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Національний університет водного господарства та природокористування,  
вул. Соборна, 11, Рівне 33000, Україна  
[m.v.moroz@nuwm.edu.ua](mailto:m.v.moroz@nuwm.edu.ua)

<sup>2</sup> Рівненський державний гуманітарний університет,  
вул. Степана Бандери, 12, Рівне 33000, Україна

<sup>3</sup> Волинський національний університет ім. Лесі Українки,  
просп. Волі, 13, Луцьк 43025, Україна

В останні роки активно досліджуються різноманітні феромагнітні матеріали, у зв'язку з можливістю отримання останніх в наноструктурованому вигляді та розширенні спектру їх практичного застосування, зокрема в медицині, біології тощо [1-3].

Нами отримано нанокристали синтетичного магнетиту електролітичним методом у відкритому скляному електролізері об'ємом 1 л з залізними електродами. Для живлення електролізера використовували стабілізоване джерело постійного струму. Електролітом слугував розчин хлорид натрію (NaCl) в дистильованій воді. Концентрація електроліту складала 5,8 г/л. Під час синтезу температура електроліту змінювалася від кімнатної до 100°C. Тривалість процесу синтезу нанокристалів становила 3 год., а густина струму -  $2,6 \cdot 10^{-2}$  А/см<sup>2</sup>. Зразки висушували на повітрі за кімнатної температури.

Рентгенівські дослідження здійснено на дифрактометрі ДРОН-4 з використанням  $\text{CuK}\alpha$  випромінювання за кімнатної температури. Сканування дифрактограм виконано за схемою Бреґга-Брентано ( $\theta$ - $2\theta$ ). Анодна напруга і сила струму складала 41 кВ і 21 мА відповідно. Крок сканування дифрактограми 0,05°, а час експозиції 5 с.

Математичну обробку експериментальних дифрактограм виконано описуючи кожний експериментальний рефлекс функціями Гауса і Коші-Лоренца. Внаслідок чого була отримана інформація про кутове положення  $2\theta$ , півширину (ширина на половині висоти)  $\beta$  та інтегральну інтенсивність  $I$ . Отримані результати використовувалися для інтерпретації експериментальних дифрактограм, визначення параметра кристалічної ґратки і розрахунку розмірів нанокристалів.

Встановлено, що нанокристали  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  отримані за кімнатної температури мають менші розміри і в них діють менші механічні напруження ніж в зразках отриманих за температури 93°C. Значення розмірів нанокристалів і відносного видовження отримані методами Вільямсона-Холла та розмірно-деформаційним близькі за значеннями. Це може свідчити про те що форма наночастинок близька до сферичної і механічні напруження мають ізотропний характер.

1. Pankhurst Q.A., Quentin A., et al. Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine. // Journal of physics D: Applied physics.- 2003. - **36**(13). - P. 167-181.
2. García-Merino B., Bringas E., Ortiz I. Synthesis and applications of surface-modified magnetic nanoparticles: progress and future prospects // Reviews in Chemical Engineering. -2022. - **38**(7). - P. 821-842.
3. Vasić K., Knez Ž., Leitgeb M. Multifunctional iron oxide nanoparticles as promising magnetic biomaterials in drug delivery: a review // Journal of functional biomaterials. -2024. - **15**(8). - P. 227.

# КЕРУВАННЯ ХІМІЧНИМ СКЛАДОМ ПЛІВОК CZS, НАНЕСЕНИХ МЕТОДОМ КВАЗІЗАМКНЕНОГО ОБ'ЄМУ

Н.В. Мороз, Я.В. Знаменщиков, А.С. Опанасюк

*Сумський державний університет, вулиця Харківська 116, Суми 40000м., Україна  
[n.moroz@ekt.sumdu.edu.ua](mailto:n.moroz@ekt.sumdu.edu.ua)*

Плівки твердого розчину  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$  (CZS) привертають увагу вчених у зв'язку з можливістю їх застосування у різних галузях науки та техніки. Зокрема, вони використовуються в системах формування та передачі зображення (медична діагностика та ін.), в акустoeлектричних приладах (підсилювачі та детектори ультразвуку), тонкоплівкових сонячних елементах, а також при виготовленні фотоелектричних перетворювачів та багатьох інших приладів. Одним із визначальних факторів керування хімічним складом, морфологією та субструктурою таких плівок є температура підкладки та випарника, вплив яких на властивості плівок CZS, отриманих методом вакуумного випаровування в квазізамкненому об'ємі (КЗО), залишається недостатньо вивченим. Метою даної роботи є встановлення впливу умов отримання на морфологію та хімічний склад плівок CZS, осаджених методом КЗО.

Полікристалічні плівки CZS отримували з суміші шихти CdS та ZnS високої чистоти (99,999 %) при співвідношенні компонентів 95:5. Осадження проводили з одного випарника на скляні неорієнтовані підкладки. Температуру випарника підтримували сталою ( $T_e = 580^\circ\text{C}$ ), тоді як температуру підкладки  $T_s$  змінювали в інтервалі (440–480)  $^\circ\text{C}$ . Після осадження плівки піддавали термічному відпалу з метою зниження дефектності та покращення структурної однорідності. Час нанесення однієї плівки складав 20 хв. Морфологію плівок та хімічний склад поверхні досліджували за допомогою електронного мікроскопа Arpeo 2C LoVac з UltraDry EDS детектором.

За результатами електронної мікроскопії встановлено, що всі зразки характеризуються щільною полікристалічною структурою без ознак пороутворення або розшарування (рис. 1). Зі зростанням температури осадження спостерігається еволюція морфології поверхні, що проявляється у формуванні більш вираженої зернистої структури та збільшенні розміру кристалітів, що особливо помітно при  $T_s = (460-480)^\circ\text{C}$ .

Типовий EDX-спектр для серії зразків наведено на вставці рис. 1(е), а результати визначення хімічного складу зразків узагальнені у таблиці 1. Хімічний аналіз підтвердив, що зразки містили лише кадмій, цинк та сірку. У всіх зразках відношення атомних концентрацій  $C_{\text{Cd}+\text{Zn}}/C_{\text{S}}$  перевищувало одиницю і лежало в межах 1,111-1,146, тобто плівки були збагачені металом. Концентрація цинку змінювалася в інтервалі (1,2-2,7) ат.% в залежності від температури нанесення плівки.

Таким чином EDX-аналіз підтвердив, що склад плівок в усьому досліджуваному температурному діапазоні формується виключно елементами вихідних сполук CdS та ZnS без виявлення сторонніх домішок. За вибраних умов

осадження, співвідношення компонентів є близьким до очікуваної стехіометрії, що свідчить про ефективність методу випаровування в КЗО у зменшенні втрат легколетких компонентів.

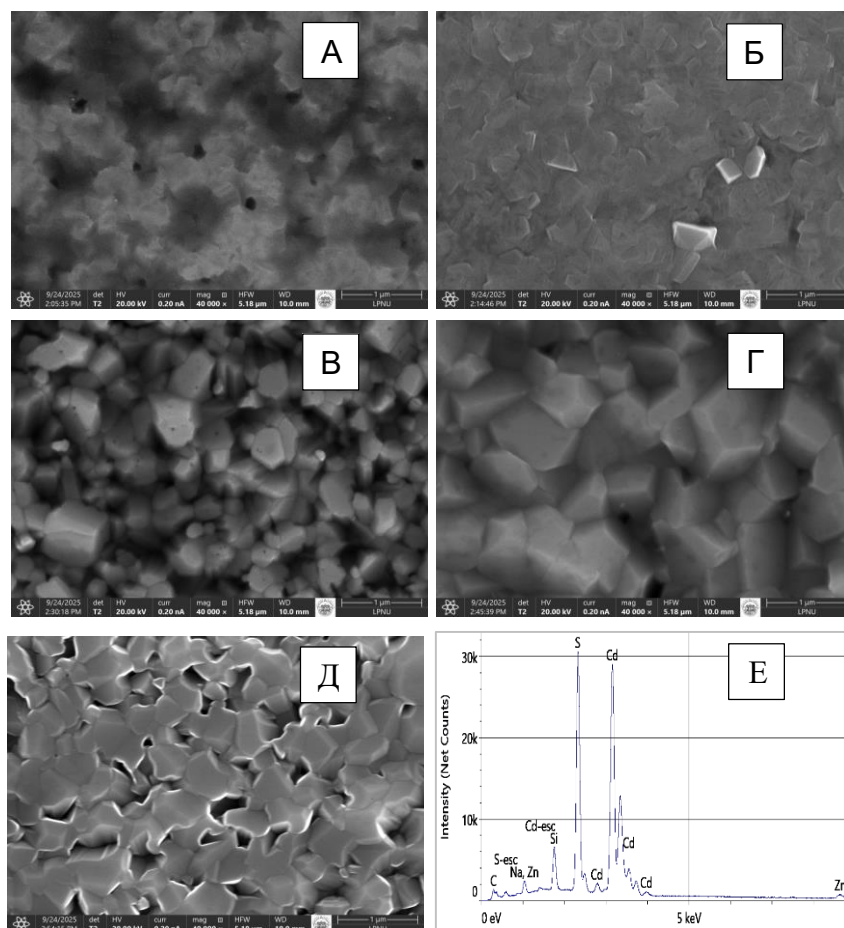


Рис. 1. Морфологія поверхні плівок CZS ( $T_e = 580\text{ }^{\circ}\text{C}$ ;  $T_s$ ,  $^{\circ}\text{C}$ : 440 (а); 450 (б); 460 (в); 470 (г); 480 (д)) та хімічний склад зразка (е)

| $T_s$ , $^{\circ}\text{C}$ | $C_{Cd}$ , at. % | $C_{Zn}$ , at. % | $C_S$ , at. % | $C_{Zn}/C_{Cd}$ | $C_{Cd}/C_S$ | $C_{Cd+Zn}/C_S$ |
|----------------------------|------------------|------------------|---------------|-----------------|--------------|-----------------|
| 440                        | 42,8             | 2,7              | 40,3          | 0,063           | 1,062        | 1,129           |
| 450                        | 38,4             | 2,7              | 37,0          | 0,070           | 1,038        | 1,111           |
| 460                        | 26,0             | 1,7              | 24,9          | 0,065           | 1,044        | 1,112           |
| 470                        | 42,7             | 1,2              | 38,3          | 0,028           | 1,115        | 1,146           |
| 480                        | 39,3             | 1,7              | 36,3          | 0,043           | 1,083        | 1,130           |

Таблиця 1 - Хімічний склад плівок CZS за даними EDX-аналізу

## Топологічні особливості розподілу електронної густини в наноструктурах $\text{BaHfO}_3$ з кисневими вакансіями

О. С. Пришляк<sup>1</sup>, Р. М. Балабай<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Криворізький державний педагогічний університет, пр. Університетський, 54, 50086, Кривий Ріг, Україна  
chronus2011@gmail.com, balabai@i.ua*

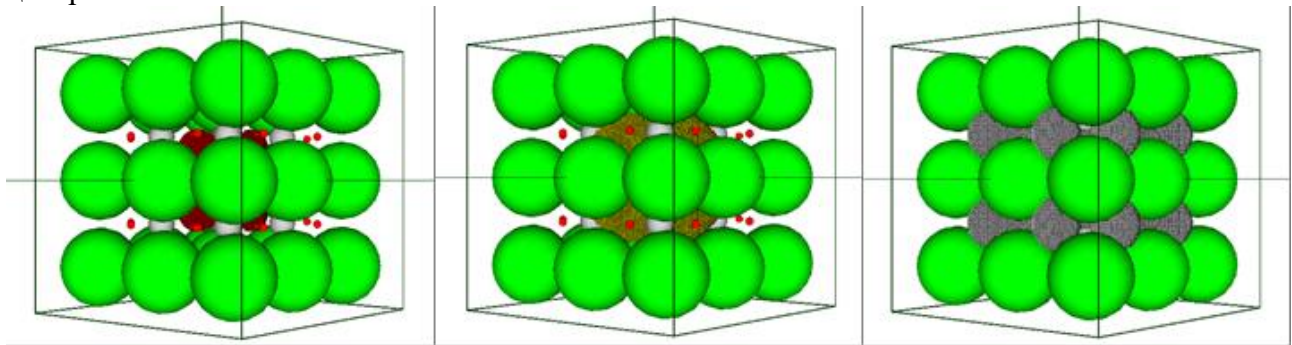
Оксид  $\text{BaHfO}_3$  перовскітного типу є широкозонним матеріалом, який виявляє високу чутливість до змін у концентрації кисневих вакансій. Такі характеристики роблять  $\text{BaHfO}_3$  чудовим кандидатом для мемристивних застосувань. У своїй ідеальній стехіометричній формі  $\text{BaHfO}_3$  кристалізується в кубічній структурі перовскіту з просторовою групою  $\text{Pm-3m}$ , де йони  $\text{Ba}^{2+}$  займають позиції кутів комірки, йони  $\text{Hf}^{4+}$  розташовані у позиціях центру комірки, а аніони  $\text{O}^{2-}$  знаходяться у гранецентрованих положеннях, формуючи октаедри  $\text{HfO}_6$ . Оптимізований параметр ґратки становить  $a = 4,171 \text{ \AA}$ , розрахована енергія утворення дорівнює  $-14,79 \text{ eV/атом}$ , що вказує на високу структурну стабільність, а обчислена заборонена зона становить приблизно  $4,92 \text{ eV}$ , підтверджуючи властивості  $\text{BaHfO}_3$  як широкозонного діелектрика [1]. Поєднання хімічної стійкості, структурної симетрії та чутливості до дефектів підкреслює потенціал  $\text{BaHfO}_3$  для використання в електроніці нового покоління на основі оксидів та у пристроях енергонезалежної пам'яті.

Для дослідження впливу видалення кисню на електронну структуру наносистем  $\text{BaHfO}_3$  методами теорії функціоналу електронної густини та першопринципного псевдопотенціалу на основі власного програмного коду Криворізького державного педагогічного університету розраховано просторові розподіли густини валентних електронів та їх спектри, зарядові стани взаємодіючих атомів, повні енергії атомних систем. Були змодельовані кілька скінченних атомних кластерів різних розмірів і концентрацій кисневих вакансій з відтворенням кристалографічного оточення кубічної перовскітної ґратки та використанням методу суперґратки. Видалення одного або кількох атомів кисню в кластерах призводить до локального спотворення перовскітного оточення та зміни розподілів заряду.

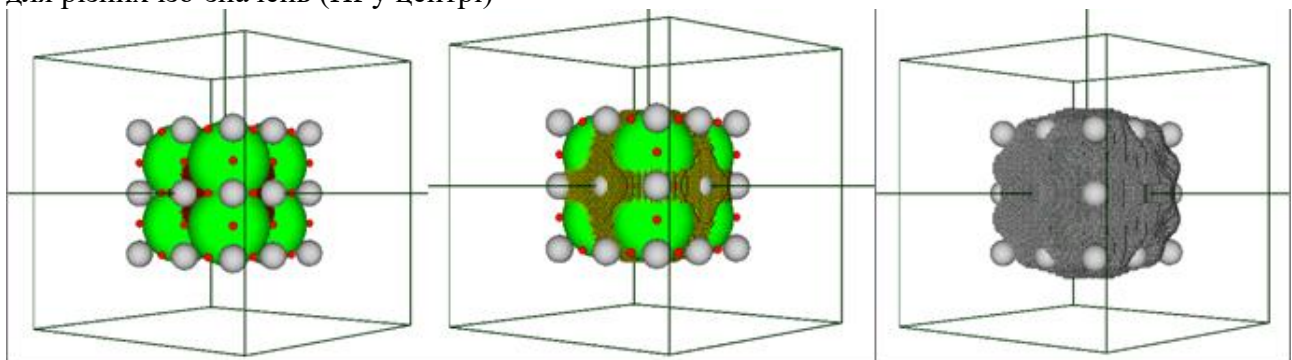
Перший кластер  $\text{BaHfO}_3$  із розміром близько  $0,9 \text{ нм}$  містив 15 атомів (1 Ba, 8 Hf, 6 O), при цьому атом Ba займав центральне положення у ґратці. Після видалення двох атомів кисню система складалася з 13 атомів, що відповідало концентрації кисневих вакансій  $9,5\%$ . Другий кластер  $\text{BaHfO}_3$  містив 21 атом (8 Ba, 1 Hf, 12 O), де центральним атомом був Hf, і мав розмір приблизно  $0,9 \text{ нм}$ . Після видалення двох атомів кисню система складалася з 19 атомів і відповідала концентрації кисневих вакансій  $13,3\%$ . Третій кластер  $\text{BaHfO}_3$  представляє собою наноструктуру з розміром приблизно  $1,27 \text{ нм}$ , що містила 71 атом (8 Ba, 27 Hf, 36 O), з центральним атомом Hf (рис. 1). Після видалення двох та чотирьох атомів кисню система складалася відповідно з 69 та 67 атомів. Концентрація кисневих вакансій становила  $2,8\%$  та  $5,6\%$ . Четвертий кластер  $\text{BaHfO}_3$  являв собою наноструктуру з розміром близько  $1,86 \text{ нм}$ , що містила 89 атомів (27 Ba, 8 Hf, 54 O) (рис. 2). Центральним атомом був Ba. Після видалення двох атомів кисню система складалася з 87 атомів. Концентрація кисневих вакансій становила  $2,24\%$ .

Порівняння повної енергії на атом для кластерів із різними атомними конфігураціями демонструє чітку енергетичну перевагу структури з центральним атомом барію. Нормалізована повна енергія для кластера з центральним атомом Ba становить  $-986,71$ , тоді як для кластера з центральним атомом Hf  $-813,35$ . Оскільки менше значення енергії відповідає більшій термодинамічній стабільності, то конфігурація з центральним атомом Ba є значно більш вигідною. Різниця в енергії, що становить приблизно  $173,36$  одиниць на атом, вказує на те, що ймовірність формування кластера з центральним атомом Ba є істотно вищою,

ніж з центральним Hf. Ця енергетична перевага може бути пояснена більшим іонним радіусом  $Ba^{2+}$  у порівнянні з  $Hf^{4+}$ , що забезпечує кращу структурну релаксацію та мінімізує напруження ґратки в кластері  $BaHfO_3$  перовскітного типу. Таким чином, за рівноважних умов очікується, що кластери  $BaHfO_3$  переважно формуватимуться навколо структурних одиниць з центральним атомом Ba.

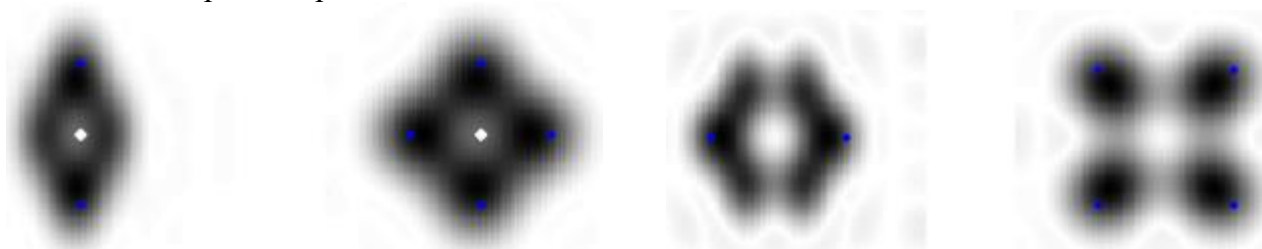


**Рис. 1.** Просторові розподіли електронної густини у скінченному кластері #3  $BaHfO_3$  для різних ізо-значень (Hf у центрі)

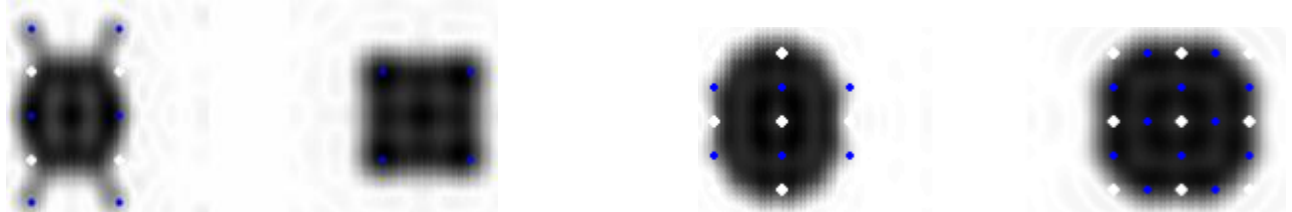


**Рис. 2.** Просторові розподіли електронної густини у скінченному кластері #4  $BaHfO_3$  для різних ізо-значень (Ba у центрі)

Топологічні особливості у розподілах заряду валентних електронів у кластерах різної структурної організації очевидно спостерігаються на перерізах просторових розподілів, що наводяться на рис. 3 – рис.4.



**Рис. 3.** Поперечні взаємно перпендикулярні перерізи розподілу електронної густини у кластері  $BaHfO_3$  # 1 (зліва), у кластері  $BaHfO_3$  # 2 (справа)



**Рис. 4.** Поперечні взаємно перпендикулярні перерізи розподілу електронної густини у кластері  $BaHfO_3$  # 3 (зліва), у кластері  $BaHfO_3$  # 4 (справа)

1. *Materials Project*. 2020 Materials Data on  $BaHfO_3$  // Materials Project.-2020.  
<https://doi.org/10.17188/1317346>

## Технологія синтезу твердого бору для іонного легування напівпровідникових структур

О.В. Косуля<sup>1</sup>, Т.М. Сабов<sup>1</sup>, О. С. Оберемок<sup>1</sup>, М.Ю. Сабов<sup>2</sup>, А. І. Погодін<sup>2</sup>, О. Ю. Роєнко<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарівського НАН України, пр. Науки, 41, Київ 03028, Україна

[alexandr250990@gmail.com](mailto:alexandr250990@gmail.com)

<sup>2</sup> Ужгородський національний університет, пл. Народна, 3, Ужгород 8800, Україна

<sup>3</sup> Інститут прикладної фізики НАН України, вул. Петропавлівська, 58, Суми 40000, Україна

Імплантація іонами бору широко використовується для створення р-п переходу в напівпровідникових структурах. Для імплантації іонами бору в промисловості використовується газ  $\text{BF}_3$ ,  $\text{BCl}_3$ , а також  $\text{B}_2\text{H}_6$ . Однак перераховані газу дуже токсичні, і дорогі, а  $\text{B}_2\text{H}_6$  вибухонебезпечний [1]. Було запропоновано дешевий і безпечний твердий бор для іонного легування в лабораторних умовах, а також розроблена технологія виготовлення катодів.

На сьогодні найбільш поширеними методами є чотири: електроліз розплаву, відновлення металами/неметалами, відновлення воднем та розкладання сполук бору [2]. Відмічається, що метод відновлення металами дає переважно аморфний бор. Морфологія бору, отриманого трьома іншими методами, може бути не тільки аморфною, але й кристалічною. Однак чітку різницю між методами отримання аморфного та кристалічного бору важко провести, по причині залежності морфології від багатьох взаємопов'язаних факторів [3]. Оскільки морфології бору не має значення для розпилення в плазмі, при виборі методу даний критерій не враховувався. Слід відмітити, що електроліз розплаву, відновлення воднем та розкладання сполук бору потребує додаткового обладнання [2]. Тому було обрано метод відновлення простими речовинами.

Аналіз літературних даних показав, що в якості відновника найчастіше використовувалися Li, Na, K, Be, Mg, Ca, Al, Zn, Hg та неметал Si. Враховуючи матеріал тиглю (алундові тиглі із високим вмістом глинозему), умови відновлення (на повітрі) та токсичність Be і Hg, потенційними відновниками було обрано Mg, Al, Zn. Аналіз термодинамічних даних [4] показав, що найменшою вільною енергією характеризуються процеси утворення оксидів Al та Mg. Однак враховуючи, що в ході відновлення побічним продуктом є оксид відновника, від алюмінію у якості відновника відмовилися. Причиною цього є те, що за високих температур утворюється  $\gamma$ -модифікація  $\text{Al}_2\text{O}_3$  із надзвичайно низькою реакційною здатністю, що унеможливорює очистку відновленого бору від нього. Таким чином, відновлення бору було здійснено за рівнянням реакції:

М

Вихідними речовинами слугували бор оксид марки ОСЧ 12.3 та порошковий магній МПФ-4, що ретельно перетиралися у агатовій ступці. Магній

В

В

М

g

брався із 10%-им надлишком по масі, маса реакційної суміші становила 10 г. Відновлення здійснювали у алундовому тиглі із кришкою у муфельній печі за температури 1373 К протягом 3 годин. Отриманий продукт оброблявся соляною кислотою для вилучення магній оксиду та інших домішків, що могли утворитися у процесі відновлення. У подальшому продукт взаємодії п'ять разів промився у великій кількості дистильованої води при 333 К протягом 4 годин для повного вилучення залишків  $B_2O_3$ . В результаті отримувався сірувато-бурі крупинки/ порошок елементарного бору, вихід продукту не перевищував 40%. Синтезований порошкоподібний бор пресувався в металевий тигель (катод) та який встановлювався в джерело іонів системи Пеннінга. Струм пучка іонів бору

Запропонований метод виготовлення катодів з твердотільного бору через простоту, безпечність та ціну є більш доцільним для використання в лабораторних умовах для набору середніх доз.

1. *Adams R. M. Boron, Metallo-Boron Compounds and Boranes*// Interscience Publishers, a Division of John Wiley & Sons, New York-London-Sydney 1964

*J*

“

*B*

*o*

*r*<sup>2</sup>

*o*

*n*

,

a325–338. DOI: 10.1002/apj.1892.

*n*

*d*

*R*

*e*

*f*

*r*

*a*

*c*

*t*

*o*

*r*

*y*

*B*

*o*

*r*

*i*

*d*

*e*

*s*

,

”

# Numerical Study of Effective Thermoelectric Properties of a Composite Material Using a Representative Volume Element Approach

R.G. Cherkez<sup>1</sup>, O.M. Porubanyi<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, вул. Сторожинецька, 101,  
Чернівці 58000, Україна  
[r.cherkez@chnu.edu.ua](mailto:r.cherkez@chnu.edu.ua)

Thermoelectric materials enable direct conversion of thermal energy into electrical energy and are widely used in energy harvesting, cooling systems, and waste heat recovery technologies. One of the promising approaches for improving thermoelectric performance is the development of composite structures consisting of a thermoelectric matrix and inclusions with different physical properties. Such structures can significantly influence electrical and thermal transport processes at the microscale and, consequently, the effective macroscopic properties of the material. Numerical modeling provides an efficient tool for analyzing these phenomena and predicting the behavior of complex heterogeneous systems [1–3].

In the present work, a numerical investigation of the effective electrical conductivity of a thermoelectric composite material was performed using the Representative Volume Element (RVE) method implemented in COMSOL Multiphysics. The composite structure consists of a thermoelectric matrix based on bismuth telluride ( $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ) with randomly distributed spherical dielectric inclusions made of aluminum oxide ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ). The use of the RVE approach allows the estimation of macroscopic transport properties from the microstructural configuration of the composite material [4], [5].

The geometric model represents a cubic representative volume element with a characteristic size is  $\mathbf{L} = 20 \text{ nm}$  containing randomly distributed spherical inclusions with radius  $\mathbf{R} = 1 \text{ nm}$ . The total number of inclusions within the computational domain is 35. The inclusions are generated using a stochastic algorithm that ensures the absence of intersection or contact between individual spheres. Such a distribution provides a statistically representative description of the microstructure while maintaining numerical stability during the finite element analysis.

The electrical transport in the composite is described using the charge conservation equation

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$$

where  $\mathbf{J}$  is the electric current density vector. The current density is determined according to Ohm's law for thermoelectric medium

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} - \alpha \nabla T$$

where  $\sigma$  is the electrical conductivity and  $\mathbf{E}$  is the electric field intensity. The electric field is related to the electric potential  $\mathbf{V}$  through the relation

Material properties were assigned to the domains according to the corresponding

$\mathbf{E} = -\nabla V$ . phase. The thermoelectric matrix based on  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  was characterized by an electrical conductivity of approximately

$$\sigma_{\text{Bi}_2\text{Te}_3} \approx 10^5 \text{ S/m}$$

while the dielectric inclusions made of  $\text{Al}_2\text{O}_3$  were assumed to have negligible electrical conductivity

$$\sigma_{Al_2O_3} \approx 0 \text{ S/m}.$$

The governing equations were solved using the **Electric Currents** physics interface within the finite element framework of COMSOL Multiphysics. To determine the effective electrical conductivity of the composite, a potential difference was applied to two opposite faces of the RVE along the x-direction. The electric potential boundary conditions were defined as

$$\begin{aligned} V(x=0) &= 0 \\ V(x=L) &= -E_x L \end{aligned}$$

which produces a uniform macroscopic electric field  $\mathbf{E}_x$  inside the computational domain. All remaining boundaries were assigned the electrical insulation condition

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{J} = 0.$$

The effective electrical conductivity of the composite material was calculated from the averaged current density obtained from the numerical simulation according to

$$\sigma_{eff} = \frac{\langle J_x \rangle}{E_x}, \quad \alpha_{eff} = -\frac{\Delta V}{\Delta T}, \quad \kappa_{eff} = -\frac{\langle q_x \rangle}{\nabla T_x}$$

The numerical model allows the visualization of the spatial distribution of electric potential and current density within the heterogeneous structure. The presence of dielectric inclusions leads to a significant distortion of electric field lines in the surrounding matrix and causes local variations of current density. These effects contribute to a reduction in the effective electrical conductivity of the composite compared to the homogeneous thermoelectric material.

The obtained results demonstrate that the microstructural configuration of the composite plays a crucial role in determining its effective transport properties. In particular, the concentration, size, and spatial distribution of dielectric inclusions significantly affect the electrical conduction pathways within the thermoelectric matrix. The proposed numerical approach can therefore be used as a tool for optimizing composite thermoelectric materials with improved performance.

1. D. M. Rowe, *Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano*. Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 2006.
2. G. J. Snyder and E. S. Toberer, "Complex thermoelectric materials," *Nature Materials*, vol. 7, no. 2, pp. 105–114, 2008.
3. H. J. Goldsmid, *Introduction to Thermoelectricity*. Berlin, Germany: Springer, 2010.
4. S. Torquato, *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties*. New York, NY, USA: Springer, 2002.
5. R. Hill, "Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 11, pp. 357–372, 1963.
6. J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. Princeton, NJ, USA: Princeton University Press, 2008.
7. COMSOL AB, *COMSOL Multiphysics Reference Manual*. Stockholm, Sweden, 2023.
8. D. Kraemer et al., "High-performance flat-panel solar thermoelectric generators with high thermal concentration," *Nature Materials*, vol. 10, pp. 532–538, 2011.

# Граничне розсіювання в двовимірних топологічних ізоляторах

О.О. Райчев<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарівського НАН України, пр. Науки, 41, Київ 03028, Україна, [raichev1300@gmail.com](mailto:raichev1300@gmail.com)

В останні роки “топологічні” матеріали, зокрема топологічні ізолятори, є предметом значного наукового інтересу. Властивості цих матеріалів обумовлені структурою і симетріями гамільтоніанів електронних систем. Хвильова функція носіїв заряду є складною, принаймні двокомпонентною, що має значний вплив на кінетичні властивості таких матеріалів. Топологічні ізолятори характеризуються присутністю пари топологічно захищених, завдяки симетрії інверсії часу, граничних станів. Електрони з протилежними проєкціями спінів у цих станах рухаються в протилежних напрямках. Наявність в топологічних ізоляторах пари кіральних граничних станів дозволяє припускати існування інших ефектів, які теж є пов'язаними з кіральністю.

Розглянемо вузьку полосу двовимірного топологічного ізолятора у провідному режимі (рівень Фермі в зоні провідності), де одновимірні граничні стани співіснують з двовимірними електронними станами. У такій системі значний внесок у кінетичні явища виникає завдяки дифузному розсіюванню електронів на неідеальних границях, яке істотно змінює просторовий розподіл електричного струму. Таке розсіювання характеризується параметром дзеркальності  $r^s$ , що задає частку електронів з проєкцією спіну  $s$ , які розсіюються дзеркально. (вважаємо, що спін електронів при розсіюванні не змінюється). Якщо параметр дзеркальності є асиметричним відносно поздовжнього імпульсу електрона  $k$  (кіральне розсіювання), то між границями з'явиться різниця потенціалів. Кірально розсіювання на границі є принципово можливим в моделі Холдейна, як наслідок порушення симетрії відносно обернення часу, що притаманне цій моделі [1].

Ефективний гамільтоніан двовимірного топологічного ізолятора [2] складається з двох блоків, які відповідають електронам з протилежними спінами. Кожен з цих блоків є гамільтоніаном моделі Холдейна, тож окремо для кожного блоку симетрія обернення часу порушена, але для цілого гамільтоніану симетрія присутня. Як наслідок, при кіральному розсіюванні на границі холлівська напруга буде відсутня, однак електрони зі спінами протилежної поляризації будуть накопичуватися на протилежних границях, тобто очікується спіновий ефект Холла.

Для опису граничного розсіювання електронів з двокомпонентною хвильовою функцією гамільтоніану моделі Холдейна використовується гранична умова Беррі-Мондрагона [3]. Неідеальна границя задається випадковою функцією  $\xi(x)$ , що визначає відхилення границі від її середнього положення. Передбачається, що середньоквадратичне цієї функції є меншим за довжину хвилі де Бройля. Задача про розсіювання вирішується ітераціями до квадратичних внесків, а усереднення по поверхні виконується за допомогою бінарної кореляційної функції  $\ll \xi(x)\xi(x') \gg = W(x - x')$  [4,5]. Отримана гранична умова для функції розподілу дійсно виявляється асиметричною відносно поздовжнього імпульсу електрона. Задача про розсіювання електронів із протилежною проєкцією спіну є аналогічною і приводить до граничної умови, що відрізняється зміною знака поздовжнього імпульсу електрона.

Отже розсіювання електронів на неідеальній границі двовимірного топологічного ізолятора проявляє кіральні властивості, а відтак може давати внесок у спіновий ефект Холла.

1. Haldane F. D. M. Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly" // Phys. Rev. Lett.-1988.-**61**.-P. 2015-2018.
2. Qi X.-L., Zhang S.-C. Topological insulators and superconductors // Rev. Mod. Phys.-2011.-**83**.-P. 1057-1110.
3. Dugaev V. K., Katsnelson M. I. Edge scattering of electrons in graphene: Boltzmann equation approach to the transport in graphene nanoribbons and nanodisks // Phys. Rev. B.-2013.-**88**.-P. 235-432.
4. Falkovsky L. A. Transport phenomena at metal surfaces // Advances in Physics.-1983.-**32**.-P. 753-789.
5. Vasko F. T., Raichev O. E. Quantum Kinetic Theory and Applications: Electrons, Photons, Phonons // Springer Science & Business Media, New York.-2006.-784 p.-ISBN 978-0-387-28041-7.

## Optical and Spectral Properties of Silicon Nanoparticle Colloidal Solutions Prepared via Mechanical

V.A. Huzieva<sup>1</sup>, O.V. Pylypova<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Educational and Scientific Institute of High Technologies, Taras Shevchenko National University of Kyiv, ave. Hlushkova 4-g, Kyiv 03022, Ukraine*

*vlada.huzeva@knu.ua*

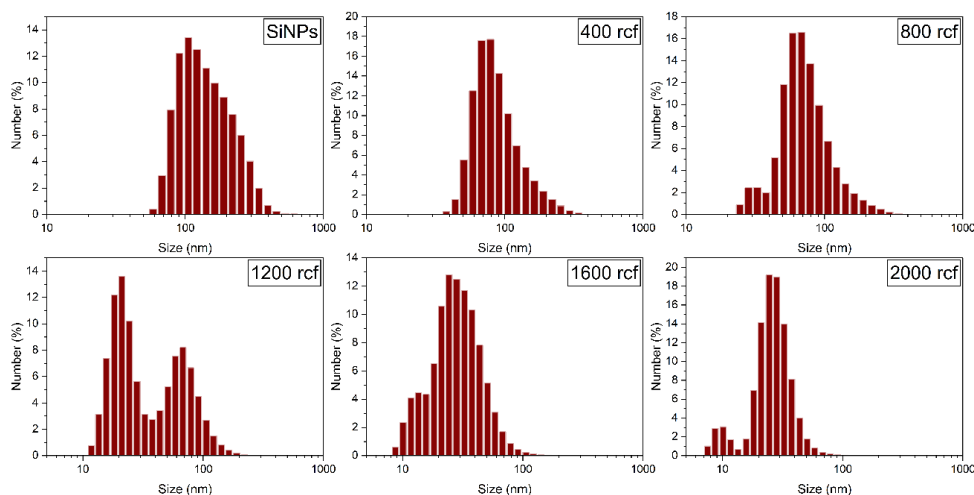
Silicon nanoparticles (SiNPs) have garnered significant research interest due to a complex of unique physicochemical properties, notably their biocompatibility, low toxicity, and photoluminescent activity [1]. These characteristics open broad prospects for their application in photovoltaics, biomedicine (as fluorescent labels), and optoelectronics. Of particular interest are «top-down» synthesis methods for SiNPs, specifically mechanical milling [1-2], which is a cost-effective and environmentally friendly approach that does not require the use of harsh chemical reagents.

The primary objective of this study is to investigate the structural characteristics and size distribution of SiNPs in colloidal systems prepared via mechanical dispersion followed by centrifugation. Crystalline and metallurgical-grade silicon (MG-Si) were utilized as the starting materials. Initially, the silicon wafers were subjected to coarse crushing. Subsequently, the resulting material was dispersed in distilled water and subjected to mechanical milling using a blender; the process was performed in 3-minute cycles with a total milling time of 45 minutes. To evaluate the particle size distribution, the obtained suspension was centrifuged for 30 minutes in increments of 100g. This fractionation process was carried out using an Eppendorf 5840R centrifuge equipped with 2 mL tubes. Given that the MG-Si powder did not undergo any additional purification stages, the presence of intrinsic impurities was anticipated. Consequently, quantitative and qualitative energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS) microanalysis was performed using a system equipped with a Bruker Nano spectrometer.

The size distribution and zeta ( $\zeta$ ) potential of the obtained fractions were characterized using dynamic light scattering (DLS). Measurements were performed on a Malvern Instruments (UK) analyzer equipped with a He-Ne laser ( $P_{\max} = 4$  mW, wavelength 632.8 nm) at a detector angle of 173°. UV-Vis absorption spectra were recorded in the 200-800 nm wavelength range utilizing an Agilent Technologies UV-Vis spectrophotometer (Mulgrave, Australia).

Analysis of the EDS spectra, acquired from various surface locations free of large nanoinclusions, indicates a fairly uniform elemental distribution. It is worth noting that the EDS spectra confirm the presence of Si in both samples. The MG-Si powder predominantly consists of silicon, exhibiting a normalized mass content (wt. norm. %) of 86.16% and an atomic content (at. %) of 73.9%.

Figure 1 shows the size distribution of the crystalline SiNP colloidal suspension. Analysis of the DLS profiles revealed that the initial SiNPs suspension is characterized by polydispersity, with a dominant peak in the 100-120 nm range (Fig. 1). A critical transformation in the size distribution occurs at 1200 rcf, where a bimodal distribution clearly emerges, accompanied by the appearance of a small-sized particle fraction (~20 nm).



**Fig. 1.** Hydrodynamic diameter distribution of the crystalline SiNP colloidal suspension at various centrifugation speeds.

Following centrifugation at 2000 rcf, the supernatant predominantly contains nanoparticles with a hydrodynamic diameter of 10-30 nm. For the MG-Si colloidal system, the emergence of a particle fraction of ~20 nm was observed at 3000 rcf. The measured zeta ( $\zeta$ ) potential of the resulting Si nanoparticle colloidal suspension is -21 mV, indicating its aggregative stability. The UV-Vis absorption spectrum exhibits three distinct features near 3.4, 4.3, and 5.4 eV, corresponding to the  $E_1$ ,  $E_2$ , and  $E_1'$  critical points of crystalline silicon, respectively.

In conclusion, a methodology for preparing stable SiNP colloidal suspensions via mechanical dispersion was successfully optimized.

**Acknowledgment:** This work was financially supported by Ministry of Education and Science of Ukraine (project 26BP07-03) and National Research Foundation of Ukraine (project 2025.07/0098).

1. T. Kim i J. Lee, «Silicon nanoparticles: fabrication, characterization, application and perspectives», *Micro Nano Syst. Lett.*, вип. 11, вип. 1, с. 18, Лис 2023, doi: 10.1186/s40486-023-00184-9.
2. Skryshevsky, V., Pylypova, O., Kovalchuk, V., Ivanov, I., Litvinenko, S., & Lysenko, V. (2025, September). Kinetics of Hydrogen Generation from Si Nanostructures and Si Powder. In *2025 IEEE 15th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP)* (pp. NEE01-1). IEEE.

## Дослідження SERS-активних підкладок на основі технології срібного дзеркала для детектування аналогів вибухових речовин та біомолекул

С.С. Сергійчук<sup>1</sup>, Н.В. Мазур<sup>1</sup>, О.А. Капуш<sup>1</sup>, В.О. Юхимчук<sup>1</sup>, В.М. Джаган<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарівського НАН України, пр. Науки, 45, Київ 03028, Україна

[Stas.Sergiychuks@gmail.com](mailto:Stas.Sergiychuks@gmail.com)

Поверхнево-підсилена раманівська спектроскопія (SERS) є ефективним методом надчутливого хімічного аналізу органічних та неорганічних речовин (аналітів). Наноструктури благородних металів (срібла, золота), сформовані на кремнієвих/скляних підкладках, і які створюють локалізований поверхневий плазмонний резонанс (LSPR) та забезпечують підсилення раманівського розсіювання від молекул аналіту, називаються «SERS-підкладками». Ефективним SERS-підкладкам повинні бути притаманні як велика ефективна площа поверхні, так і наявність великої концентрації «гарячих точки» – місць тісного контакту між плазмонними наночастинками (НЧ) [1-5]. Крім того, для масового застосування, технологія їх виготовлення повинна бути дешевою і простою в реалізації.

В даній роботі представлено результати детектування малих концентрацій різних типів молекул-аналітів на таких підкладках, виготовленими за допомогою реакції срібного дзеркала [4]. Синтез SERS-активних підкладок проводився за однокроковою методикою з використанням реактиву Толленса та 5% розчину глюкози як відновника. Реактив Толленса готували шляхом додавання концентрованого аміаку ( $\text{NH}_4\text{OH}$ ) до 1% розчину  $\text{AgNO}_3$  до повного розчинення осаду оксиду срібла. Процес формування плівки здійснювався шляхом нанесення суміші реактиву та відновника у співвідношенні 1:2 на скляні підкладки. Для прискорення реакції та формування стабільної наноструктурованої поверхні підкладки витримували на водяній бані протягом 5 хв до повного випаровування розчину. Морфологічні дослідження за допомогою скануючої електронної мікроскопії (СЕМ) підтвердили утворення щільно упакованого масиву багатогранних кристалітів срібла, що є оптимальним для генерації інтенсивного SERS-відгуку.

Ефективність розроблених підкладок була досліджена детектуванням 4-нітрофенолу (4-NP), аденіну та родаміну 6G на них. Встановлено, що для детектування нітросполук (4-NP) та барвника родаміну 6G оптимальним є використання лазера з довжиною хвилі 532 нм, тоді як для біомолекул, таких як аденін, найкраще підсилення спостерігається при збудженні лазером 457 нм. У результаті проведених вимірювань було зафіксовано значне підсилення відгуку для всіх аналітів. Зокрема, 4-нітрофенол вдалося зареєструвати до концентрації до  $10^{-9}$  М включно, при цьому в спектрах чітко ідентифікуються характерні піки  $1340\text{ см}^{-1}$  (симетричне коливання  $\text{NO}_2$ ) та  $1590\text{ см}^{-1}$  (розтягування бензольного кільця). Аналіз аденіну на розроблених плівках показав можливість реєстрації речовини до концентрації  $10^{-4}$  М з основною смугою біля  $730\text{ см}^{-1}$ . Особливо високу ефективність підсилюючих властивостей підкладки продемонстрували при вимірюванні стандартного для SERS аналіту - родаміну 6G, сигнал якого був

зафіксований при екстремально низькій концентрації  $10^{-15}$  М. Варто зауважити, що без використання SERS-активної поверхні родамін 6G реєструється лише при концентраціях порядку  $10^{-5}$  М, що підтверджує значне підсилення відгуку (рівня  $10^8 - 10^{10}$ ) за рахунок локалізації електричного поля в гарячих точках розробленої структури.

Таким чином, розроблений метод виготовлення високоефективних SERS-підкладок за короткий час та без потреби у складному обладнанні є перспективним для створення портативних сенсорних систем експрес-діагностики як небезпечних речовин та біооб'єктів.

Дана робота виконана в межах гранту НАН України дослідницьким лабораторіям/групам молодих вчених НАН України на 2026-2027 № 09/01-2026(7).

1. Muehlethaler C., Leona M., Lombardi J. R. Review of surface enhanced Raman scattering applications in forensic science // *Anal. Chem.* 2016, 88, 152–169.
2. Mazur N., Dzhagan V., Kapush O. et al. SERS of nitro group compounds for explosives sensing // *RSC Adv.* 2025, 15, 252–260.
3. Dzhagan V., Mazur N., Kapush O. et al. Self-organized SERS substrates with efficient analyte enrichment in the hot spots // *ACS Omega* 9, 2024, 4819–4830.
4. Mazur N.V. et al. Facile SERS substrates from Ag nanostructures chemically synthesized on glass surfaces // *Physics and Chemistry of Solid State.* 2023, 24, 4, 682–691.
5. Cheng M.-L., Yang J. Influences of Composition on Electroless Deposition of Silver Nanoparticles on Glass Substrates for SERS Measurements // *Appl. Spectrosc.* 2008, 62, 12, 1353–1360.

# Charge Transport and Dielectric Response of the Spark-Plasma Sintered Barium Titanate Ceramics with Different Carbon Content

Denis O. Stetsenko<sup>1</sup>, Oleksii V. Berezniukov<sup>1</sup>, Taisiia O. Kuzmenko<sup>1,2</sup>, Oleksandr S. Pylypchuk<sup>1</sup>, Serhii E. Ivanchenko<sup>3</sup>, Victor I. Styopkin<sup>1</sup>, Victor V. Vainberg<sup>1</sup>, Volodimir N. Poroshin<sup>1</sup>, and Anna N. Morozovska<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, 46 Nauky Avenue, 03028 Kyiv, Ukraine*

[wh.denis.stetsenko@gmail.com](mailto:wh.denis.stetsenko@gmail.com)

<sup>2</sup> *Educational Scientific Institute of High Technologies, Taras Shevchenko National University of Kyiv, 4-g Hlushkova Avenue, 03022 Kyiv, Ukraine*

<sup>3</sup> *Frantsevich Institute for Problems in Materials Science, National Academy of Sciences of Ukraine Omeliana Pritsaka str., 3, Kyiv, 03142, Ukraine*

Barium titanate ceramics with a different content of carbon were synthesized by spark-plasma sintering (SPS). The samples were fabricated using the mixture of BaTiO<sub>3</sub> and carbon was placed into a graphite press-form with the diameter of 20 mm and sintered during several minutes by the SPS at 1100 °C in vacuum and under uniaxial pressure of 50 MPa [1]. The sample S1, S2, S3 was prepared from mixture BaTiO<sub>3</sub> nanoparticles and different vol.% of carbon. The concentration and distribution of carbon impurity inside the samples was estimated by scanning electron microscopy (see Fig. 1).

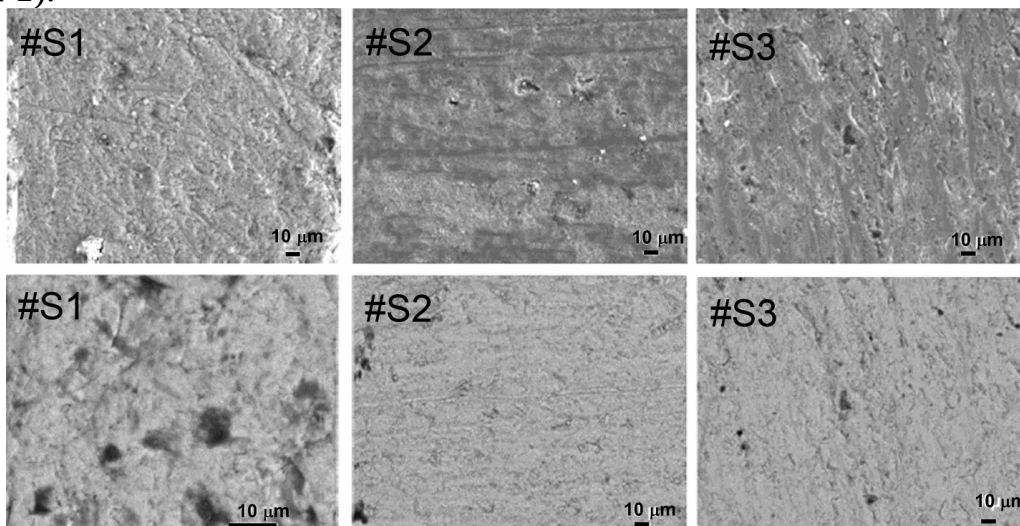


Figure 1. SEM images of the samples S1, S2, and S3 (see legends).

Temperature dependences of  $\epsilon$  and  $R$  of the samples S1, S2, S3 measured at frequencies of 10 Hz and 100 kHz are shown in Fig. 2. They reveal the behavior inherent to the hopping conduction. The magnitude of  $R$  decreases significantly (about by order of magnitude) with increase in the frequency from 10 Hz to 500 kHz.

Performed analysis [1] revealed that the conductivity of the SPS BaTiO<sub>3</sub> ceramic in the temperature range from 290 K to 77 K is determined by the variable range hopping (VRH) mechanism and obeys the Mott law at small voltages, without charge carriers heating. The important peculiarity is the dependence both of  $R$  and  $\epsilon$  of SPS BaTiO<sub>3</sub> ceramics on the carbon content in samples. In the temperature range of VRH conduction the larger is the carbon content, the smaller is the  $R$  and the larger is the  $\epsilon$ . Moreover, an inverse functional relation between the  $R$  and the  $\epsilon$  is valid

qualitatively. Also, the sharp increase of  $R$  temperature slope in the region of  $\varepsilon$  maximum evidences the validity of the Heywang model [2] into the conduction mechanism, which manifests itself in changing parameters of conductivity due to the  $\varepsilon$  changes. We also measured the current-voltage characteristics in the short-pulse regime to avoid the Joule heating [1].

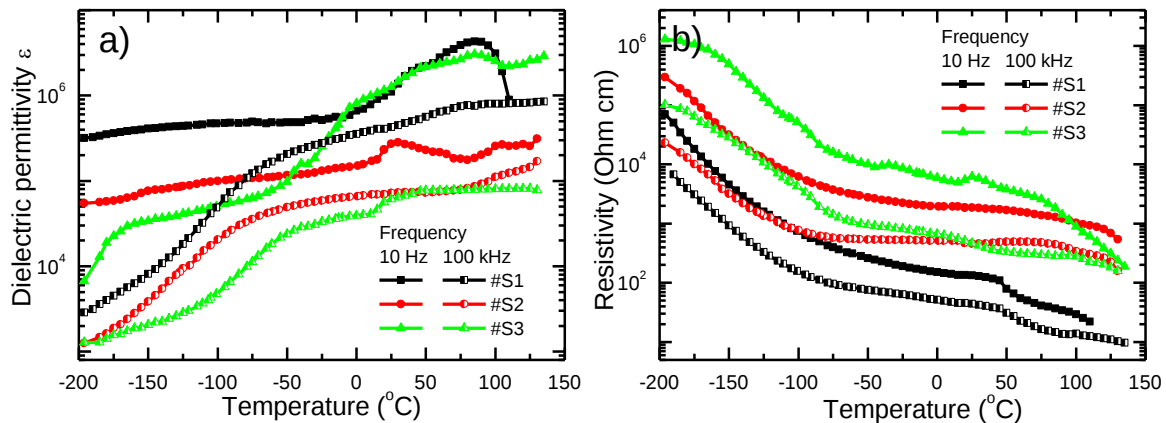


Figure 2. Temperature dependences of dielectric permittivity (a) and resistivity (b) of the samples S1, S2, S3. Measurements were carried out at frequencies of 10 Hz and 100 kHz.

They obey the well-known VRH model for conduction in the strong electric field evolved by Hill [3], Pollak and Riess [4]. Based on these models we estimated the parameters of the VRH conduction: the average value of the localized states density near the Fermi level is of order of  $10^{17} \text{ eV}^{-1}\text{cm}^{-3}$ , the charge carrier wave function localization radius in average of 1 to 6 nm.

**Acknowledgments.** The work of D.O.S., O.S.P. and A.N.M. are funded by the NRF of Ukraine (project “Manyfold-degenerated metastable states of spontaneous polarization in nanoferroics: theory, experiment and perspectives for digital nanoelectronics”, grant application 2023.03/0132). The work of V.V.V. and V.N.P. are funded by the Target Program of the NAS of Ukraine, Project No. 5.8/25-II “Energy-saving and environmentally friendly nanoscale ferroics for the development of sensorics, nanoelectronics and spintronics”.

1. O. S. Pylypchuk, V.V. Vainberg, D. O. Stetsenko, *et al.* Electric Charge Transport and Dielectric Properties of the Barium Titanate Ceramics Obtained by Spark-Plasma Sintering with Different Carbon Content (2026); <https://doi.org/10.48550/arXiv.2601.12060>.
2. W. Heywang. Semiconducting barium titanate. J. Mater. Sci. 6, pp.: 1214–1224 (1971); <https://doi.org/10.1007/BF00550094>.
3. R. M. Hill. Hopping conduction in amorphous solids. The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics, 24(192), 1307–1325 (1971); <https://doi.org/10.1080/14786437108217414>.
4. M. Pollak, I. Riess. A percolation treatment of high-field hopping transport. J. Phys. C: Solid State Phys., 9, 2339–2352 (1976); <https://doi.org/10.1088/0022-3719/9/12/017>.

# ВПЛИВ ТЕРМІЧНОГО ВІДПАЛУ НА ВЛАСТИВОСТІ НАНОСТРУКТУР ZnO-Zn, ОТРИМАНИХ МЕТОДОМ ШВИДКОГО СОНЯЧНОГО ВИПАРОВУВАННЯ

Ю.О. Ковальський<sup>1</sup>, О.Є. Байбара<sup>1</sup>, Л.А. Миронюк<sup>1</sup>, В.А. Карпина<sup>1</sup>, О.І. Оліфан<sup>1</sup>,  
С.П. Старик<sup>2</sup>, А.С. Ніколенко<sup>3</sup>, І.М. Даниленко<sup>3</sup>, А.І. Євтушенко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича, НАН України,  
03142, вул. Омеляна Пріцака, 3, Київ, Україна

<sup>2</sup>Інститут надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля, НАН України, 04074,  
вул. Автозаводська, 2, Київ, Україна

<sup>3</sup>Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова, НАН України,  
пр. Науки, 41, Київ, Україна

Оксид цинку (ZnO) є перспективним напівпровідниковим матеріалом для застосування у фотокаталізі, сенсорних системах та оптоелектроніці. Для одержання мікро- та наноструктур ZnO традиційно застосовують такі методи, як золь-гель, гідротермальний, хімічне осадження з парової фази тощо. Водночас інноваційним та екологічно чистим («зеленим») підходом є використання концентрованого сонячного випромінювання - метод швидкого сонячного випаровування (англ. *Rapid Solar Evaporation*, RSE) [1].

У цій роботі досліджено вплив термічного відпалу на повітрі на властивості наноструктур ZnO-Zn, синтезованих методом RSE [2]. Комплексний аналіз зразків проводили за допомогою рентгенівської дифракції, сканувальної електронної мікроскопії, елементного аналізу, фотолюмінесцентної та раманівської спектроскопії, а також оцінювали їхню фотокаталітичну активність на метиловому оранжевому барвнику.

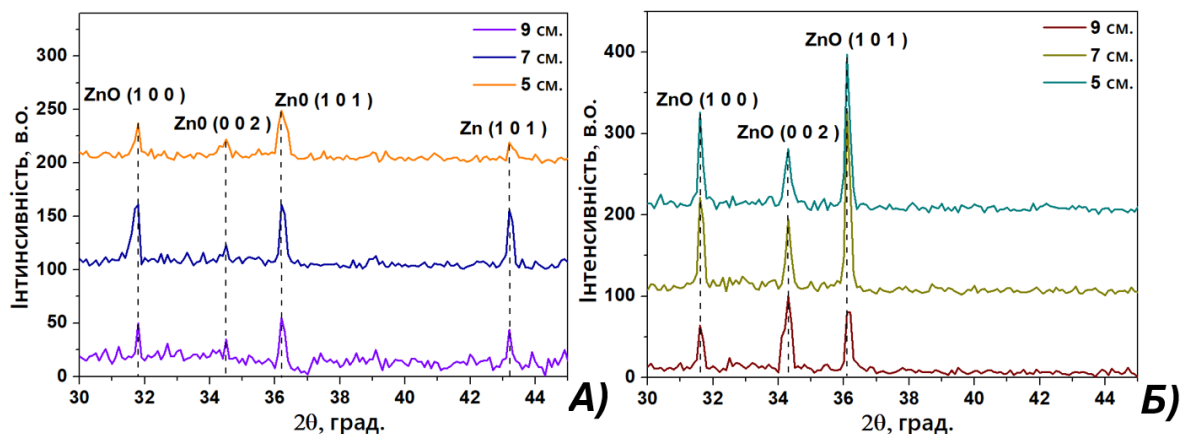


Рис. 1. Рентгенограми зразків ZnO, отриманих за різної відстані між прекурсором і підкладкою (5, 7 та 9 см): а - до відпалу; б - після термічного відпалу.

За даними рентгенівської дифракції, у вихідних зразках, отриманих методом RSE, поряд із піками оксиду цинку зафіксовано також присутність

металевого цинку (Рис. 1). Термічний відпал призвів до збільшення розміру кристалітів (ОКР) ZnO та зникнення фази Zn. Це свідчить про повне окиснення цинку та формування більш досконалої кристалічної структури ZnO.

За результатами сканувальної електронної мікроскопії, термічний відпал призводить до суттєвої зміни морфології: сферичні частинки цинку, отримані методом RSE, після окиснення перетворюються на частинки ZnO з характерною голчато-сферичною морфологією (Рис. 2).

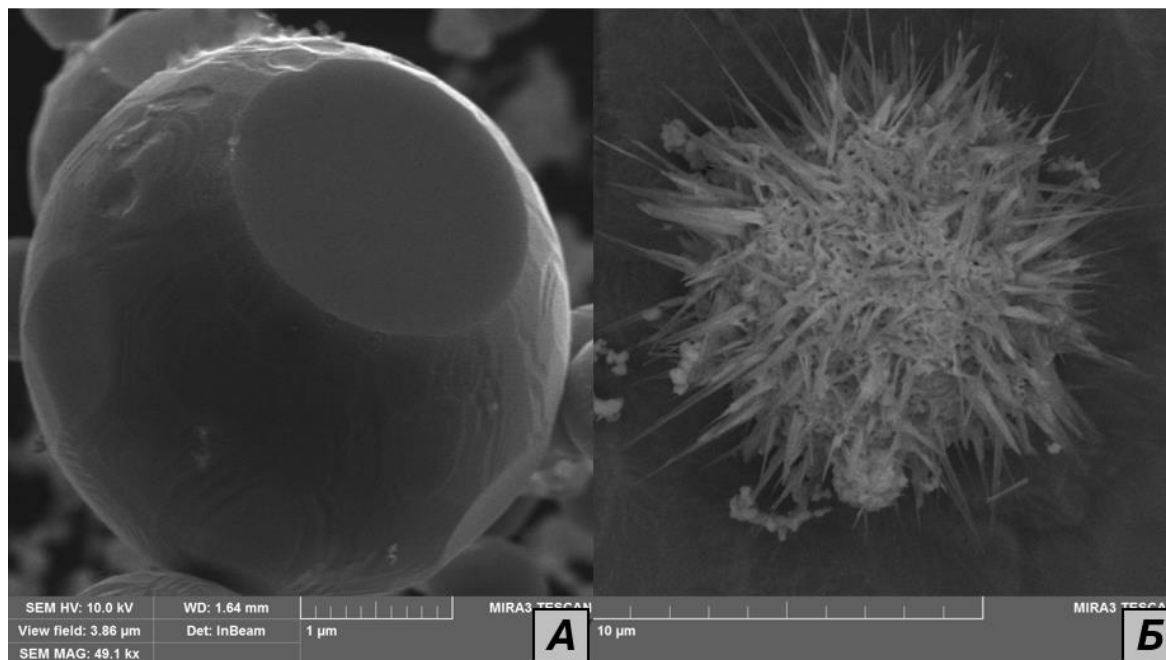


Рис. 2. СЕМ-зображення: а - сферичні частинки Zn (до відпалу); б - голчато-сферичні структури ZnO (після термічного відпалу).

Встановлено, що термічний відпал забезпечує повне перетворення металевого цинку на оксидну фазу та сприяє формуванню мікроструктур із характерною голчато-сферичною морфологією. Детальне обговорення отриманих результатів буде представлено під час доповіді.

1. Ю.О. Ковальський, В.А. Карпина, О.І. Оліфан, С.Ф. Корічев, С.П. Старик, В.В. Стрельчук, А.І. Євтушенко. Властивості конгломератів ZnO-Zn, вирощених на неполірованих Si підкладках методом карботермічного відновлення з використанням концентрованого сонячного випромінювання // Успіхи матеріалознавства.- 2025.- **10/11**. – С. 4-12.
2. Y.O. Kovalskyi, V.A. Karpyna, L.A. Myroniuk, O.I. Olifan, S.F. Korichev, I.M. Danylenko, S.P. Starik, V.V. Strelchuk, A.I. Ievtushenko. Properties of ZnO-Zn conglomerates grown on unpolished Si substrate by carbothermal reduction under rapid solar evaporation // Chemistry, Physics and Technology of Surface. – 2026. – **17**. – P. 83-92.

## Оптичні характеристики плівок ZnMgO для застосування у фотодетекторах

Б.Р. Бойко, Р.М. Пшеничний, М.С. Єрмаков, О.А. Доброжан, А.С. Опанасюк

*Сумський державний університет, вул. Харківська, 116, Суми, 40007, Україна*

*E-mail: b.bojko@ekt.sumdu.edu.ua*

Оксид цинку (ZnO) є одним із найбільш важливих багатофункціональних матеріалів електроніки. Завдяки своїм фізичним властивостям, зокрема широкій забороненій зоні ( $E_g = 3,36$  eV), великій енергії зв'язку екситонів ( $\sim 60$  meV), високій рухливості електронів, значній оптичній прозорості, радіаційній стійкості та екологічній безпечності, він знаходить широке застосування у лазерах і світлодіодах (LED), фотодетекторах, газових сенсорах, сонячних елементах та прозорій електроніці.

Важливим завданням для налаштування спектрального діапазону випромінювання та оптичної чутливості оксиду при використанні у оптоелектроніці, зокрема у фотодетекторах та LED, є керування його оптичними характеристиками, у тому числі шириною забороненої зони  $E_g$ . Одним із способів реалізації такого керування є легування оксиду цинку ізовалентною домішкою - магнієм. У твердих розчинах  $Zn_{1-x}Mg_xO$  ширина забороненої зони може змінюватися в широкому спектральному діапазоні від 3,36 eV (ZnO) до приблизно 7,8 eV (MgO) за кімнатної температури. Хоча ZnO має гексагональну структуру, а MgO кубічну типу NaCl, близькі значення іонних радіусів  $Mg^{2+}$  та  $Zn^{2+}$  забезпечують можливість їх часткового взаємного заміщення, незважаючи на відмінність кристалічних ґраток.

Плівки  $Zn_{1-x}Mg_xO$  отримують за допомогою різних фізичних, таких як магнетронне розпилення, імпульсне лазерне осадження, і хімічних методів, таких як хімічне осадження з ванни, спрей-піроліз, соль-гель метод, методом центрифугування тощо. Одним з найбільш перспективних хімічних методів є метод спрей-піролізу, який поділяється на ультразвуковий та імпульсний (PSP). Останній характеризується кращим контролем процесу розпилення прекурсора, що забезпечує більш рівномірне осадження плівки та зменшує ймовірність агломерації крапель, мінімізуючи утворення дефектів і пор. Даний метод є економічно доцільним, технологічно простим, він добре масштабується, що робить його придатним для отримання плівок оксидів для різноманітних використань.

Плівки твердого розчину  $Zn_{1-x}Mg_xO$  були нанесені на скло методом PSP з молекулярних розчинів з використанням газу переносника - аргону в широкому інтервалі складів ( $0 \leq x \leq 1$ ). Оптичні властивості плівок досліджували за допомогою спектрофотометра Specord 210 Plus (Analytik Jena) у діапазоні довжини хвилі  $\lambda = (300-1100)$  нм. При цьому реєстрували спектри пропускання  $T(\lambda)$  та відбивання  $R(\lambda)$  зразків, на основі яких визначали питомий коефіцієнт поглинання ( $\alpha$ ).  $E_g$  плівок визначали методами апроксимації Таука та аналізу першої похідної коефіцієнта поглинання (ACFD). Ширину забороненої зони

оксидів першим методом визначали шляхом екстраполяції лінійної ділянки графіка в координатах  $(\alpha h\nu)^{1/2} - h\nu$  до перетину з віссю енергій ( $h\nu$ ). У другому випадку нами будувалася спектральна залежність похідної  $d\alpha$  від  $h\nu$ . Положення максимуму відповідної кривої за віссю енергій відповідає міжзонному переходу зона-зона.

Метою дослідження було встановлення впливу вмісту магнію ( $x$ ) у плівках твердого розчину  $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ , отриманих методом PSP, на їхні оптичні властивості.

Встановлено, що досліджувані тверді розчини характеризуються немонотонною зміною оптичної прозорості зі зростанням вмісту Mg. Зі збільшенням концентрації магнію до  $x = 0,4$  спостерігається зменшення  $T$ , після чого відбувається його подальше зростання. Плівки з високим вмістом Mg ( $x = 0,7-1,0$ ) демонструють високу оптичну прозорість у видимому спектральному діапазоні на рівні (75-85) %, а також підвищене пропускання в UV області спектра. Водночас зі збільшенням вмісту Mg спостерігається зменшення  $R$ . Найбільші значення характерні для чистого ZnO (10-14 %), тоді як для плівок з  $x = 0,3-1,0$  (2,0-4,0 %).

Аналіз отриманих даних показує, що для нелегованої плівки ZnO значення  $E_g$ , визначені методами ACFD та апроксимації Таука, становлять 3,31 та 3,26 еВ, тоді як для MgO ці значення дорівнюють 4,35 та 4,22 еВ. При введенні магнію у ZnO ширина забороненої зони спочатку зростає і досягає максимуму  $E_g = 3,57$  еВ (ACFD) при  $x = 0,3$ , після чого дещо зменшується до 3,46 еВ при  $x = 0,7$ . Подальше збільшення вмісту магнію ( $x \geq 0,8$ ) приводить до різкого зростання  $E_g$ . Аналогічна тенденція зміни  $E_g$  спостерігається і для значень, визначених методом апроксимації Таука, хоча вони є дещо меншими порівняно з результатами ACFD. Зменшення  $E_g$  у діапазоні концентрацій Mg  $x = 0,4-0,7$  може бути пов'язане з частковим фазовим розділенням у плівках, тоді як відмінності між методами визначення  $E_g$  пояснюються появою хвостів Урбаха, що виникають внаслідок розупорядкування кристалічної ґратки при введенні магнію. Визначено значення параметра Урбаха  $E_U$ , що характеризує ці хвости для досліджених зразків.

Отримані результати свідчать про можливість керування  $E_g$  плівок  $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$  шляхом зміни вмісту магнію. Зі збільшенням концентрації Mg спостерігається розширення  $E_g$ , що зумовлено заміщенням іонів  $\text{Zn}^{2+}$  іонами  $\text{Mg}^{2+}$  у кристалічній ґратці. Одержані результати свідчать про придатність досліджуваних плівок для використання у фотодетекторах.

# **Integrated Growth Model for Si-rich-HfO<sub>2</sub> and Si-rich-SiO<sub>2</sub> Thin Films Deposited by Magnetron Sputtering**

D. Khomenkov<sup>1</sup>, F. Gourbilleau<sup>2</sup>, O. Melnichuk<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Mykola Gogol State University of Nizhyn, 2 Graftska str., Nizhyn 16600, Ukraine*

*E-mail: khomenkov.dv@ndu.edu.ua*

<sup>2</sup>*Centre de recherche sur les Matériaux et la Photonique, F-14000 Caen, France*

Hafnia and silica as well as their solid solutions, particularly those containing silicon excess, are of significant interest due to their promising electrical and optical properties. The increasing demand for the functional properties of such thin films and structures on their basis requires precise control over their microstructure and uniformity of chemical composition, thickness and optical constants. For films grown by radio-frequency magnetron sputtering, careful control of deposition conditions such as the power applied to the cathode target, gas pressure, target-substrate distance, and substrate temperature is necessary to gain insight on the mechanism of the film nucleation and growth. This requirement becomes even more critical for the films produced from a single composite target and deposited onto a non-rotate substrate. Our recent study revealed a substantial significant radial non-uniformity in the thickness and optical properties of hafnia-based films, highlighting the need for a more advanced description of the growth process.

Among available growth models, the classical approaches commonly applied to magnetron sputtering do not account for the macroscopic distribution of the particle flux over the substrate and therefore cannot quantitatively describe the inherent thickness non-uniformity observed on non-rotated samples. This limitation identifies a clear gap in existing theoretical models and underscores the necessity of developing a physical model capable of incorporating both macroscopic film-formation mechanisms and microscopic processes such as nucleation, diffusion, and chemical interaction of species sputtered from the target.

In this work, an integrated growth model is proposed and applied to described the properties of Si-rich films deposited by magnetron sputtering of composed Si:HfO<sub>2</sub> target in argon plasma. The Si content in the target was controlled by varying the number of Si calibrated discs placed on the HfO<sub>2</sub> target. The target-substrate distance and substrate temperature were varied in the range 35-60 mm and 100-400 °C, respectively. The properties of these films were compared with earlier fabricated Si-rich-SiO<sub>2</sub> films in the same deposition unit. The experimental data revealed a strong dependence of the film thickness on the target-substrate distance: decreasing the distance led to a steeper radial gradient and a higher central deposition rate. Conversely, high separation between the target and substrate resulted in a smoother thickness profile due to enhanced lateral spreading of the particle flux while the smaller growth rate.

To develop the growth model, there were combined (i) the hydrodynamic description of jet-like flux spreading upon impact, (ii) a modified structural-zone model, and (iii) a mechanism of silicon incorporation governed by the ratio of

sputtering yields of Hf, Si and O. This comprehensive approach makes it possible to describe the formation of the thickness profile, the development of the microstructure, and the evolution of film composition within a single physical framework.

The first component of the model is the macroscopic description of the directed flux of particles. Under magnetron sputtering conditions, particles are ejected from the target and travel through the low-pressure gas in a predominantly ballistic regime, producing a strongly axial angular distribution. Upon reaching the substrate, this flux loses momentum and spreads radially on the substrate, generating a thickness distribution as  $\sim 1/r$  dependence. The impact-spreading formulation enables a quantitative representation of this behavior via an analytical expression for the impact-layer thickness, which takes into account the characteristic velocity of the particles and the elastic properties of the growing film. This macroscopic description for Si-rich-HfO<sub>2</sub> is equally applicable to Si-rich-SiO<sub>2</sub>, although the numerical parameters differ due to the distinct mechanical properties of their respective host matrices. The analysis shows that the macroscopic component is essential for explaining the experimentally observed thickness gradient on non-rotated substrates.

On the microstructural level, the model incorporates limited surface mobility of adatoms and nucleation mechanisms characteristic of low-temperature sputtering. In Si-rich-SiO<sub>2</sub>, an amorphous network forms naturally, modified by Si–Si and Si–O bonds, which increase density and optical polarizability without inducing crystallization due to their covalent nature. In Si-rich-HfO<sub>2</sub>, the situation is more complex: pure HfO<sub>2</sub> tends to crystallize at elevated substrate temperatures, but the introduction of excess silicon promotes the formation of mixed Hf–O–Si units that disrupt the local order and suppress the formation of crystalline (very often monoclinic) grains. Thus, silicon acts as an effective amorphizing agent in both systems, although the mechanisms of structural stabilization are different. Microstructural analysis within the extended Thornton zone model reveals that Si-rich oxides can be described within an expanded Zone T, where amorphous or fine-grained structures dominate being depended on substrate temperature.

A key aspect of the model is the description of the mechanism of silicon incorporation. The actual Si content in the films is determined not only by the geometric fraction of Si-containing areas on the composed sputtering target but also by the ratio of sputtering yields of silicon and the oxide matrix. Since the sputtering yield of Si exceeds that of HfO<sub>2</sub>, silicon enriches the plasma and, consequently, the film. The Hf/Si flux ratio agrees well with the experimentally measured Hf/Si concentrations by Auger electron spectroscopy.

In summary, the developed integrated model provides a unified physical basis for describing the growth of Si-rich-SiO<sub>2</sub> and Si-rich-HfO<sub>2</sub> films. It explains both the macroscopic thickness profile and the microstructural stabilization of the amorphous state, as well as the increase in optical density. The model is consistent with the experimental results and can be used to optimize magnetron sputtering processes for producing dielectric films with tailored characteristics. The results have practical significance for the development of optical coatings and multilayer structures, photoluminescent systems, and high-k dielectric components.

## **Секція 2**

***Фотовольтаїка та енергозбереження***

***Photovoltaics and Energy Efficiency***

# Technological Aspects and Electrophysical Characteristics of CdTe Photodetectors

B.I. Zhara, T.M. Mazur

*Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas, 15 Karpatska St., Ivano-Frankivsk, 76019, Ukraine*  
*bohdana.zhara-b251@nuing.edu.ua*

Photodetectors are essential in modern optoelectronic systems for converting optical radiation into electrical signals. They are widely used in measurement systems, radiation diagnostics, and solar energy devices. The efficiency of photodetectors depends on both design and material properties.

Cadmium telluride (CdTe) is a direct bandgap semiconductor ( $E_g \approx 1.5$  eV at 300 K), which aligns well with the solar spectrum, making it an efficient material for photovoltaic applications [1,2]. CdTe also exhibits high absorption, radiation resistance, and chemical stability [3]. Optimization of technological processes and doping is required to improve the photoresponse of CdTe-based structures. In particular, the control of defect states and recombination centers plays a crucial role in determining the efficiency of charge carrier generation and transport.

CdTe single crystals were grown using the Bridgman method, producing n-type material with resistivity  $\sim 100 \Omega \cdot \text{cm}$ . Substrates ( $4 \times 4 \times 1 \text{ mm}^3$ ) were polished chemically and mechanically, achieving mirror-like surfaces verified by photoluminescence.

Lithium doping was performed via vapor-phase diffusion using  $\text{Li}_2\text{CO}_3$  at 980 °C for 1.5 h, ensuring uniform dopant distribution. Barrier structures were formed by depositing a gold (Au) film via vacuum evaporation. Pre-deposition thermal treatment improved adhesion, and deposition at  $\leq 10^{-4}$  Torr provided uniform contacts [4]. The formation of a rectifying contact at the metal–semiconductor interface leads to the creation of a Schottky barrier.

The electrical properties of the structures were determined by measuring current–voltage (I–V) characteristics over  $10^{-2} - 5 \times 10^2 \text{ V}$  and  $10^{-11} - 10^{-1} \text{ A}$  (Fig. 1). The forward current in Schottky diodes can be described by the thermionic emission model:

$$I = I_s \left( \exp \left( \frac{qV}{nkT} \right) - 1 \right),$$

where  $I_s$  is the saturation current,  $q$  is the electron charge,  $V$  is the applied voltage,  $n$  is the ideality factor,  $k$  is Boltzmann's constant, and  $T$  is the temperature.

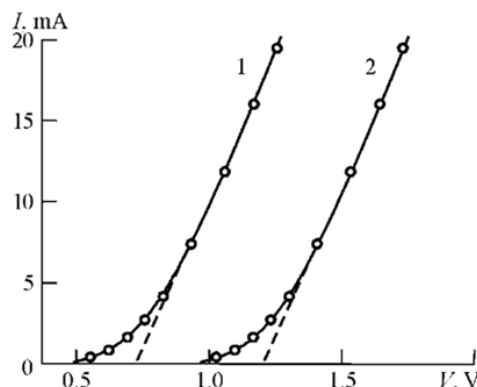


Fig. 1. Straight branches of the current-voltage characteristics of diodes with conventional (1) and modified (2) surfaces.

The saturation current is determined by the Schottky barrier height and can be expressed as:

$$I_s = A^*T^2 \exp\left(-\frac{q\varphi_B}{kT}\right),$$

where  $A^*$  is the effective Richardson constant and  $\varphi_B$  is the barrier height.

The formation of a Schottky barrier at the Au–CdTe interface induces band bending (Fig. 2). Under illumination, photons with  $h\nu \geq E_g$  generate electron–hole pairs, which are separated by the electric field in the depletion region, producing photocurrent. The efficiency of this process depends on the width of the depletion region and carrier lifetime.

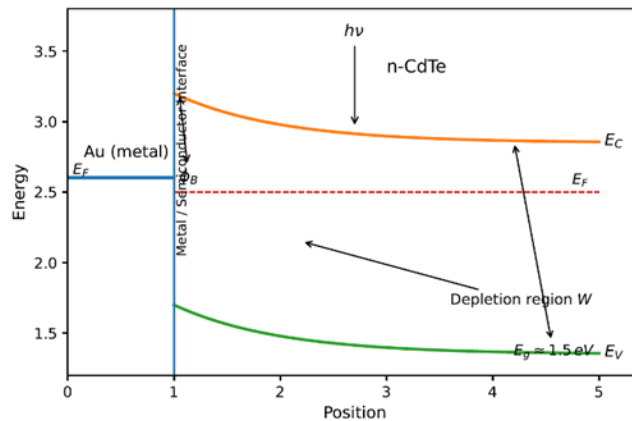


Fig. 2. Energy band diagram of the Au–CdTe Schottky barrier structure illustrating band bending and the separation of photogenerated charge carriers.

Barrier height and depletion width strongly influence sensitivity and response speed. Lithium doping and surface modification enhance carrier collection efficiency and device stability. A decrease in interface state density leads to reduced recombination losses and improved device performance.

Surface treatment in  $\text{Li}_2\text{CO}_3$  suspension further improved photostructure properties. Comparison with unmodified samples showed a stable slope in the I–V linear region, indicating series resistance  $R_0$  stability. The temperature coefficient of barrier height was nearly an order of magnitude higher than that of the bandgap, highlighting the dominant role of interface effects.

The results demonstrate CdTe's potential for high-efficiency photodetectors in solar and optoelectronic systems. Bridgman growth yields high-quality crystals, lithium diffusion improves electrophysical properties, and optimized surface and contact technologies enhance stability and sensitivity. The obtained results can be used for further optimization of CdTe-based devices and development of high-performance photodetectors.

1. Mazur T.M., Prokopiv V.V., Mazur M.P., Pysklynets U.M. Solar cells based on CdTe thin films // *Physics and chemistry of solid state*. – 2021. – **22**, N 4. – P. 817-827. <https://doi.org/10.15330/pcss.22.4.817-827>.
2. Korbutiak D.V., Melnychuk S.V., Korbut Ye.V., Borysiuk M.M. Teluryd kadmiu: domishkovo-defektni stany ta detektorni vlastyvyosti. – 2000. – Kyiv: Ivan Fedorov. – P. 198.
3. Mazur T.M., Mazur M.P., Vakaliuk I.V. Solar cells based on CdTe thin films (II Part) // *Physics and chemistry of solid state*. – 2023. – **24**, N. 1. – P. 134-145. <https://doi.org/10.15330/pcss.24.1.134-145>.
4. Makhniy V. P., Berezovskiy M. M., Kinzerska O. V., Mazur M. P., Mazur T. M., Prokopiv V. V. Prospects of using surface and barrier CdTe-diodes in solar energy // *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. – 2019. – **16**, N 2. – P. 32-42. <https://doi.org/10.18524/1815-7459.2019.2.171227>.

## Fluorescence quenching of MEH-PPV via gold and silver nanoparticles in aqueous solution

**V. V. Kuznietsov<sup>1</sup>, P. V. Demydov<sup>1</sup>, A. M. Lopatynskiy<sup>1,2</sup>, V. K. Lytvyn<sup>1</sup>, M. M. Khutko<sup>1</sup>, I. I. Hudzenko<sup>1</sup>, V. I. Chegel<sup>1,2</sup> and O. L. Kukla<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 41 Nauky Avenue, Kyiv 03028, Ukraine

<sup>2</sup> Educational Scientific Institute of High Technologies, Taras Shevchenko National University of Kyiv, 4-g Hlushkova Avenue, Kyiv 03022, Ukraine  
[vikuznietsov42@gmail.com](mailto:vikuznietsov42@gmail.com)

Fluorescent materials can be widely used for developing cheap sensitive elements for bio- and chemosensors exhibiting rapid visually detectable response. Previously, we studied fluorescence enhancement of pyrene in the presence of gold (AuNP) and spherical silver (AgNP) nanoparticles [1]. Metal-enhanced fluorescence can be highly efficient when key parameters such as nanoparticle size and fluorophore–metal spacing are properly controlled; for example, in other studies optimized systems incorporating gold nanoparticles have demonstrated fluorescence intensities increased by up to ~280-fold compared to non-metallic counterparts [2]. However, both excessively large and close fluorophore–metal distances can reduce emission due to quenching effects [3]. Therefore, it is crucial to maintain an optimal distance between the fluorophore and the metal surface for effective fluorescence enhancement. At the same time, quenching effects as well as fluorescent enhancement can be used for sensoric purposes.

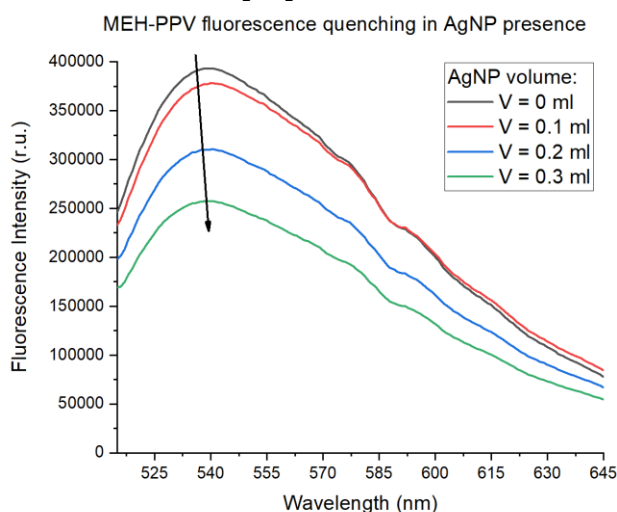


Figure 1 Fluorescence spectra of MEH-PPV in THF solution upon emission quenching by adding spherical silver nanoparticles with a diameter of ~10-20 nm.

In this study, we examined the effect of AuNP and AgNP on the fluorescence intensity quenching of the conjugated polymer MEH-PPV (Fig. 1). Our results indicate that the addition of aqueous solutions of AuNP and AgNP to the solution of MEH-PPV in THF solvent with a concentration of 1 mg/ml leads to a partial fluorescence intensity quenching. It was shown that the fluorescence quenching is 34.9 % after addition of 300  $\mu$ l AgNP and 29.6 % after addition of 300  $\mu$ l AuNP into 1 ml solution of MEH-PPV.

This allows us to consider spherical plasmonic AgNP and AuNP with a radius of ~10-20 nm as effective

quenchers for MEH-PPV. By optimizing the system in terms of nanoparticle coating and solvent environment, it can become a basis for a plasmon-enhanced fluorescence sensor for explosives.

*This work was funded by grant of the NAS of Ukraine to research laboratories/groups of young scientists no. 09/01-2026(7).*

1. Demydov, P. V., Lopatynskiy, A. M., Kuznietsov, V. V., Lytvyn, V. K., Khutko, M. M., & Chegel, V. I. (2025). Ag Nanoparticles Concentration Impact on Plasmon-Enhanced Fluorescence of Pyrene in Solution and Nanocomposite Thin Film. *Journal of Nano- and Electronic Physics*, 17(6), 06010–06016. [https://doi.org/10.21272/jnep.17\(6\).06010](https://doi.org/10.21272/jnep.17(6).06010)

2. Kaja S., Damera D. P., Nag A. (2020). A metal-enhanced fluorescence sensing platform for selective detection of picric acid in aqueous medium. *Analytica Chimica Acta*, 1129, 12—23. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2020.07.001>

## **Розробка технології підготовки матеріалів для створення квантових сенсорів на основі точкових контактів Янсона**

M. Romanov<sup>1</sup>, D. Harbuz<sup>1</sup>, V. Gudimenko<sup>1</sup>,  
O. Pospelov<sup>2</sup>, D. Chudak<sup>3</sup>, I. Zinchenko<sup>4</sup>, G. Kamarchuk<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України,  
Прспект Науки, 47, Харків, 61103, Україна*

<sup>2</sup>*Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,  
вул. Кирпичова, 2, Харків, 61002, Україна*

<sup>3</sup>*Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна,  
майдан Свободи, 4, 61022, Харків, Україна*

<sup>4</sup>*Науково-технологічний комплекс “Інститут монокристалів” НАН України,  
пр. Науки, 60, Харків, 61072, Україна*

Аналіз дихання – це галузь, що швидко розвивається, оскільки видихуваний газ містить багато складових, які дозволяють проводити швидку медичну діагностику стану організму людини. Серед перспективних інструментів для вирішення таких діагностичних завдань знаходяться провідні сенсори. Нещодавні відкриття, зроблені за допомогою квантових точково-контактних сенсорів, призвели до залучення квантових механізмів до селективного виявлення компонентів складних газових середовищ [1]. Солі на основі тетраціанохінодиметану (TCNQ) є перспективними матеріалами для чутливих елементів таких пристроїв завдяки своїй напівпровідниковій природі та схильності до утворення наноструктур з великою площею поверхні [2]. Однак реалізація квантових механізмів детектування в точково-контактних сенсорах критично залежить від чистоти вихідного матеріалу, а комерційно доступні сполуки TCNQ часто не відповідають цим суворим вимогам [3].

Наша робота була спрямована на розробку та оптимізацію технології та обладнання для очищення синтетичних провідників, що застосовуються для виготовлення квантових точково-контактних сенсорів. Комерційна речовина TCNQ з початковою чистотою 98% не забезпечує необхідних умов для синтезу високоякісних точкових контактів Янсона, що використовуються для створення квантових сенсорів [2]. Тому ми розробили технологію та пристрій для тонкого очищення органічних провідників. Технологія очищення базувалась на ефекті вакуумної зонної сублімації, використовуючи здатність твердих речовин сублімувати під зниженим тиском. Сировина розміщувалась у кварцовій трубці під вакуумом. Резистивний нагрівач, що рухався вздовж трубки за допомогою крокового двигуна, створював рухому зону сублімації, обмежену тefлоновим поршнем. Температура точно регулювалася за допомогою нагрівального елемента та контролювалася вбудованою термopарою. Прилад був підключений до персонального комп'ютера, що дозволяло програмувати параметри сублімації.

Очищену речовину TCNQ було проаналізовано за допомогою хроматографії, яка показала чистоту до 99,8%. Очищений матеріал згодом використовували для синтезу відповідної сполуки TCNQ та виготовлення квантових точково-контактних сенсорів. Електричні вимірювання підтвердили, що створені чутливі елементи відповідають критеріям точкових контактів Янсона [2], що дозволяє використовувати квантові механізми селективного виявлення, необхідні для комплексного аналізу дихання [1].

1. G. Kamarchuk, A. Pospelov, L. Kamarchuk et al. *Sci Rep.* 13, 21432 (2023).  
<https://doi.org/10.1038/s41598-023-48207-0>.

2. D.A. Harbuz, A.P. Pospelov, V.A. Gudimenko, et al. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 718(1), 25 (2021) <https://doi.org/10.1080/15421406.2020.1861518>.

3. O. Pyshkin, G.Kamarchuk, A. Yeremenko, A. Kravchenko, A. Pospelov, Yu. Alexandrov, and E. Faulques, *J. Breath Res.*, 5(1), 016005 (2011). <https://doi.org/10.1088/1752-7155/5/1/016005>.

## Nickel Ion Detection Using Functionalized Carbon Dots by Optical Absorption Method

V. Gnyniuk<sup>1</sup>, O.V. Pylypova<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Educational and Scientific Institute of High Technologies, Taras Shevchenko National University of Kyiv, ave. Hlushkova 4-g, Kyiv 03022, Ukraine

[viktoriagn@knu.ua](mailto:viktoriagn@knu.ua)

Environmental and water resource contamination by heavy metals poses serious risks to both ecosystems and human health worldwide. Exposure to heavy metals has been linked to numerous health issues, including cancer, skin disorders, cardiovascular diseases, and neurological impairments.[1] Among these metals, nickel (Ni) is one of the most abundant and widely utilized, particularly in the production of stainless steel, metal alloys, and batteries [2].  $\text{Ni}^{2+}$  can also occur naturally in the environment in the form of oxides and sulfides, originating from sources such as volcanic dust, soil, and certain food products, including baked beans [3]. In this work, a simple  $\text{Ni}^{2+}$  sensor with high sensitivity, selectivity, accuracy, practicality, and adsorption capacity was developed using carbon dots (CD). CD were synthesized via solvothermal carbonization of a precursor mixture composed of urea and anhydrous citric acid in a molar ratio of 2:1. A solution was prepared in which the dilution of particles was carried out using an ammonia buffer. The stock solution of ammonium (25%) was prepared in a volume of 350 mL with pH = 10. For experimental work, the stock solution was diluted tenfold, while the dilution of particles remained unchanged -1/16 relative to the ammonia buffer solution.

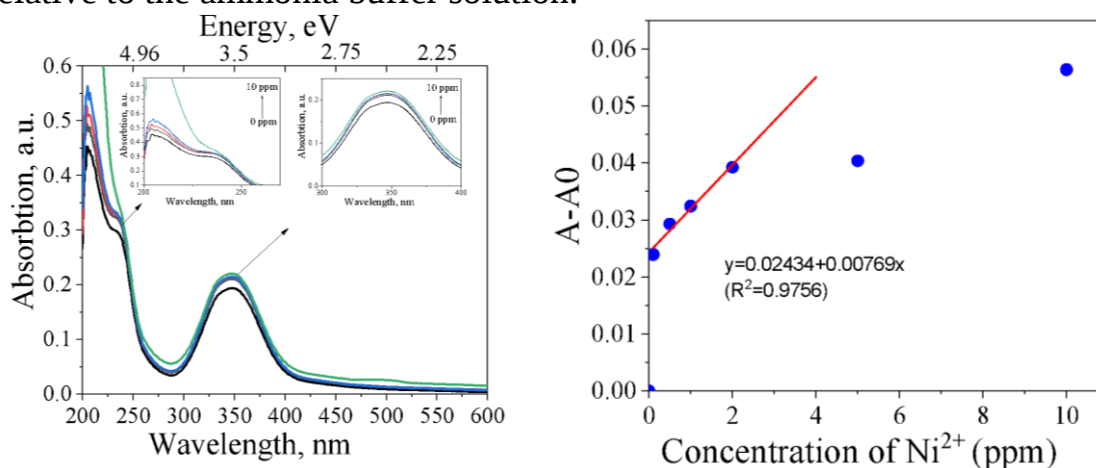


Fig. 1. (a) UV-visible absorption spectra of carbon dots (CDs) and their changes after the addition of  $\text{Ni}^{2+}$  ions at different concentrations and (b) A calibration plot of the absorbance difference ( $A - A_0$ ) as a function of  $\text{Ni}^{2+}$  concentration in the linear range.

The particle sizes with and without the addition of metal were determined using a ZetaSizer Nano instrument based on the dynamic light scattering (DLS) technique.

The instrument is equipped with a He–Ne laser ( $P_{\max}=4$  mW, 632.8 nm, detector position  $173^\circ$ ). For statistical analysis, the measurements were performed 10 times, with 10 repetitions for each measurement. The solution volume was fixed at 1 mL. The selected concentrations of nickel ranged from 0.1 to 10 ppm. Fluorescence spectrum were recorded in the CaryEclipse fluorescence spectrophotometer (Varian Company, USA). Ultraviolet visible absorption spectrum was tested by the Cary Eclipse Varian 50 Scan spectrophotometer, operating within a wavelength range of 190 to 600 nm. All absorbance measurements were carried out in a SUPRASIL® quartz cuvette. DLS measurements revealed that the average size of the carbon dots was approximately 50 nm.

The absorption spectra of CDs were at 6 eV, 5.2 eV and 3.5 eV. From the UV-vis spectrum, the CD exhibited a broad absorption similar to other previously reported carbon dots [2] A peak at around 250 nm was caused by  $\pi$ - $\pi^*$  transition of the aromatic  $sp^2$  carbon in the carbon dots. [3]. Another peak at about 350 nm (3.5 eV) is attributed to  $n$ - $\pi^*$  transition.

CDs are known as excellent chelating ligands for complexation with metal ions, making them appropriate for use as metal ion sensors. The dependence of absorbance on  $Ni^{2+}$  concentration was further investigated using five concentrations ranging from 0 to 10 ppm. The results showed that the absorbance intensity of the carbon dots increased with increasing  $Ni^{2+}$  concentration (see inset in Fig. 1).

The limit of detection (LOD) and limit of quantification (LOQ) were calculated using the equations  $LOD = 3.3\sigma/S$  and  $LOQ = 10\sigma/S$ , where  $\sigma$  is the standard error of the intercept and  $S$  is the slope of the calibration curve (see Fig. 1b). The calculated LOD and LOQ values were 4.86 ppm and 14.7 ppm, respectively.

**Acknowledgment:** This work was financially supported by Ministry of Education and Science of Ukraine (project 26BP07-03) and National Research Foundation of Ukraine (project 2025.07/0098).

1. Carbon dots-based fluorescence and UV–vis absorption dual-modal sensors for  $Ag^+$  and L-cysteine detection Shan Lu, Zixuan Li, Xueyu Fu, Zhigang Xie, Min Zheng. *Dyes and Pigments* Volume 187, March 2021, 109126
2. Phetcharee, K., Sirisit, N., Manyam, J., & Paoprasert, P. (2021). Highly sensitive  $Ni^{2+}$  sensors based on polyurethane-derived, label-free carbon dots with high adsorption capacity. *ChemistrySelect*, 6(31), 7964-7971.
3. Gong, Y., & Liang, H. (2019). Nickel ion detection by imidazole modified carbon dots. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 211, 342-347.

## Features of excitation of spectral SPR in films of high-conductive metals

A.I. Biletskiy, O.L. Kukla, O.M. Fedchenko

*V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine,  
03028, Kyiv, pr. Nauki, 41, Ukraine,  
[belanton11@gmail.com](mailto:belanton11@gmail.com)*

**Abstract.** Conditions and peculiarities for excitation of surface plasmon-polariton resonance (SPR) in thin films of high-conductive metals (gold, silver, copper, and aluminum) in the range of visible light wavelengths were considered. A new approach to assessing the possibility of implementing SPR in films of these metals in certain regions of the visible spectrum is proposed. The approach is based on the analysis of the spectral characteristics of the surface plasmon-polaritons (PP) attenuation length at the metal/dielectric interface. We demonstrate the correlation of this length with the optical constants and the imaginary part of the metals permittivity, as well as with a number of essential parameters of the SPR curve itself to substantiate the relevance of this approach. The aim of such an analysis is using the features of the SPR spectral effect in films of different high-conductive metals for creation chromatic sensors of gas environment.

**Introduction.** The modern development of optoelectronic sensors is aimed at creating portable devices for rapid analysis of complex gas and liquid mixtures. Chromatic sensors based on the SPR effect, unlike traditional monochromatic sensors, use the spectral response in the visible wavelength range, which allows to significantly expand the informativeness of this method. However, the efficiency of plasmon excitation and the sensitivity of such sensors directly depend on the choice of the plasmon-carrying coating and its optical parameters in the relevant spectral region.

**Results.** The paper provides a theoretical justification for the choice of plasmon-carrying layers based on gold, silver, copper and aluminum by analyzing their optical characteristics and determining the effective spectral ranges of SPR excitation in these layers. The study calculates the complex wave vector  $k_{sp}$  of surface plasmon-polaritons, where its imaginary part  $\text{Im } k_{sp}$  acts as a determining factor for internal losses and, accordingly, the attenuation length  $L_{sp}$  (or energy propagation length) of surface PPs in the metal, and also calculates the depth of field penetration into the metal  $D_m$  and outside into the dielectric  $D_d$ . The last parameter allows to estimate the size of the external environment being probed. The simulation was carried out for the Kretschmann optical configuration, where a thin metal film is deposited on a BK7 glass substrate brought into contact with a prism using an immersion liquid. The calculation of the spectral dependences of the reflectance coefficient  $R(\lambda, \theta)$  was performed by the Jones matrix method.

For each type of metal, the optimal film thickness was previously determined, which provides the minimum value of the reflection coefficient in the relevant spectral range: Ag - 50–56 nm, Au - 45–50 nm, Cu - 40–43 nm and Al - 17–20 nm [1]. To

assess the quality of the resonance curves, the parameter FOM (Figure of Merit) was introduced, the value of which was calculated as the ratio of the depth of the SPR curve to its half-width FWHM, i.e.  $FOM = \Delta R / FWHM$ . Fig. 1 shows the obtained 3-dimensional diagrams for the specified quality parameter, as well as for the imaginary part of the wave vector of the PP  $Im k_{sp}$ . The last parameter characterizes the value of the attenuation of surface PPs during their propagation from the place of generation. From the established correlation of the parameters  $\Delta R / FWHM$  and  $Im k_{sp}$  it follows that high resonant characteristics of the SPR curve are directly related to low PP attenuation, and vice versa, weak resonant characteristics indicate high PP attenuation. Thus, the magnitude of the imaginary part of the PP wave vector serves as a kind of indicator of the realization of the SPR effect in certain spectral regions and angles of incidence of light for different materials. On the other hand,  $Im k_{sp}$  is nothing more than half the reciprocal of the PP attenuation length in the metal,  $L_{sp} = 1/2Im k_{sp}$ .

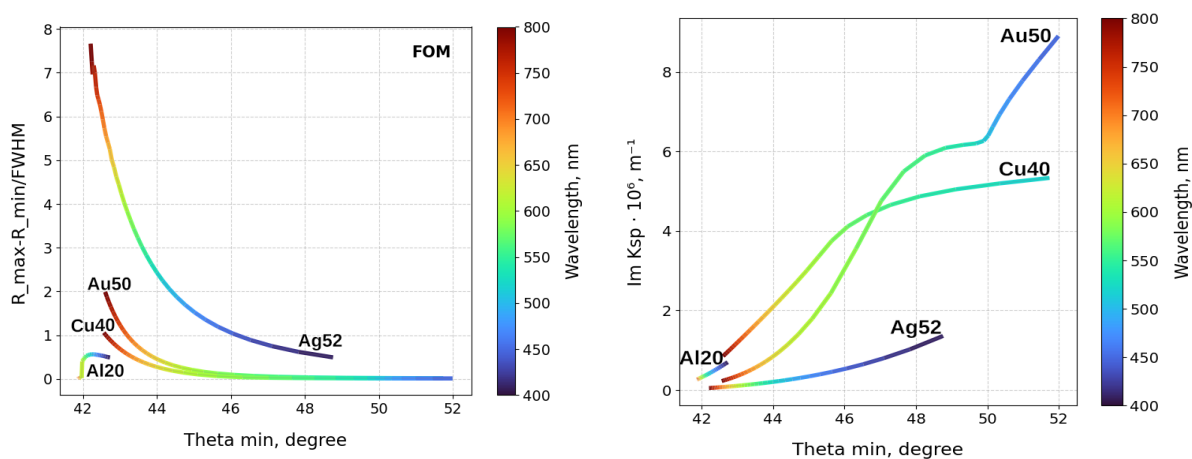


Fig. 1. Diagrams for the ratio of the depth of the reflection coefficient minimum to the half-width of the resonance curve  $\Delta R / FWHM$  (a), and the imaginary part of the PP wave vector (b) in the coordinates of the wavelength and the angle of the SPR minimum.

**Conclusions.** As an alternative to the well-known condition  $\varepsilon'_m < -\varepsilon_d$  for the existence of the SPR effect in films of high-conductive metals at the metal-dielectric interface, it is proposed to use the value of the attenuation length  $L_{sp}$  of the surface PP in the metal. It has been theoretically calculated and experimentally confirmed that for the excitation of SPR in metal films, this value must exceed the threshold of  $\sim 2 \mu m$ . Calculations have shown that for silver, the value  $L_{sp}$  remains high (from 3 to 70  $\mu m$ , respectively, when the wavelength changes from 400 to 700 nm) in the entire visible range. Aluminum (with value  $L_{sp}=6-18 \mu m$ ) is more suitable for the short-wave blue region of the spectrum, where it simultaneously demonstrates a significantly greater probing depth compared to other metals. At the same time, for gold and copper, the value  $L_{sp}$  reaches the excitation threshold only in the long-wave region above 600 nm.

1. A.I. Biletskiy, O.L. Kukla, Yu.M. Shirshov, O.S. Kondratenko, O.M. Fedchenko. Peculiarities of implementation of spectral SPR effect in thin films of high-conductive metal thin films for creation SPR gas sensors // SPQEO, 2025, V.28, No.4, P. 502-510.

## Термоелектричні сенсори теплового потоку з комп'ютерною системою керування та обробки результатів вимірювань

В.В.Бойчук<sup>1</sup>, Р.Р. Кобилянський<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського, 2,  
Чернівці 58012, Україна

*email.of. [Boichuk.vadym.vi@chnu.edu.ua](mailto:Boichuk.vadym.vi@chnu.edu.ua)*

<sup>2</sup> Інститут термоелектрики НАН та МОН України, вул. Науки, 1, Чернівці 58029,  
Україна

Розробка високочутливих сенсорних систем для контролю теплових параметрів є актуальним завданням сучасної медичної діагностики та технічних застосувань. Термоелектричні давачі на основі напівпровідникових матеріалів забезпечують унікальні можливості для створення компактних вимірювальних пристроїв з високою точністю реєстрації температурних полів та густини теплового потоку [1,2].

Представлена багатоканальна вимірювальна система призначена для одночасної реєстрації температури та щільності теплового потоку в декількох точках досліджуваного об'єкта. Конструкція сенсорного елемента базується на застосуванні термоелектричних матеріалів системи вісмут-телур, що характеризуються стабільними термоелектричними властивостями в робочому діапазоні температур [3,4]. Кожен вимірювальний модуль інтегрує термістор для визначення температури та термоелектричну батарею для реєстрації теплового потоку, забезпечуючи компактні габарити 14×14×3 мм при високій просторовій роздільній здатності.

Електронна частина системи реалізована на базі мікроконтролера з вбудованим аналого-цифровим перетворювачем 16-бітної розрядності. Мультиплексування цифрових сигналів дозволяє послідовно опитувати від 4 до 10 вимірювальних каналів з частотою дискретизації 2 Гц на канал [5]. Обмін даними з персональним комп'ютером здійснюється через стандартний USB-інтерфейс, що забезпечує надійну передачу інформації та живлення пристрою.

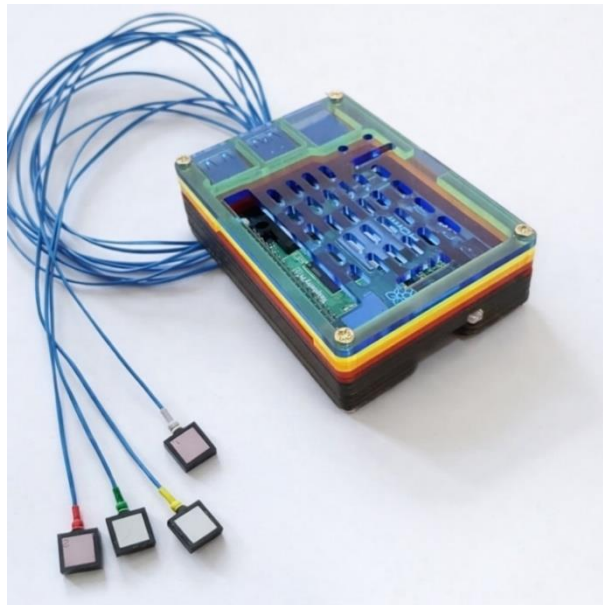


Рис.1 Багатоканальний термоелектричний тепломір: електронний реєстратор з інтегрованим АЦП та мікроконтролером і термоелектричний сенсор

Спеціалізоване програмне забезпечення виконує функції збору, обробки та візуалізації вимірювальних даних у режимі реального часу. Система автоматично застосовує калібрувальні коефіцієнти, збережені в енергонезалежній пам'яті для кожного каналу окремо, та перетворює цифрові значення у фізичні величини температури ( $^{\circ}\text{C}$ ) та густини теплового потоку ( $\text{мВт/см}^2$ ) [6]. Графічний інтерфейс користувача забезпечує одночасне відображення динаміки зміни параметрів по всіх активних каналах, що дозволяє проводити порівняльний аналіз теплового стану різних ділянок об'єкта дослідження.

Метрологічні характеристики розробленої системи включають точність вимірювання температури  $\pm 0,1^{\circ}\text{C}$  та похибку визначення густини теплового потоку не більше 5% в діапазоні 1-100  $\text{мВт/см}^2$ . Функціонал статистичної обробки дозволяє обчислювати середні значення, стандартні відхилення, мінімальні та максимальні величини для кожної вимірювальної сесії. Експорт даних у формат CSV забезпечує сумісність з поширеними пакетами статистичного аналізу.

Багатоканальна архітектура системи відкриває можливості для різноманітних діагностичних застосувань. Одночасний контроль теплових параметрів у декількох точках дозволяє виявляти локальні зміни температури та теплового потоку, що свідчать про запальні процеси, порушення кровопостачання або нейротрофічні розлади [1,7]. Неінвазивний характер контактних вимірювань робить методику придатною для багаторазових обстежень без дискомфорту для пацієнта.

Розроблена термоелектрична сенсорна система демонструє значні переваги порівняно з існуючими діагностичними технологіями: висока точність вимірювань дозволяє реєструвати незначні теплові зміни на ранніх стадіях патологічних процесів; багатоканальність забезпечує комплексне картування теплового стану; суттєво нижча вартість обладнання та експлуатації порівняно з методами візуалізації. Портативна конфігурація, швидка процедура вимірювання та мінімальні вимоги до підготовки оператора роблять систему особливо придатною для експрес-діагностики при масових обстеженнях у профілактичній медицині та епідеміологічних дослідженнях [8].

1. *Kobylianskyi R., Yuryk O., Strafun S. et al.* Use of thermoelectric heat meters in locomotor therapy for the rehabilitation of patients with lumbosacral spine injuries // *Journal of Thermoelectricity*.-2024.-**4**.-P. 69-88.
2. *Yuryk O., Anatychuk L., Kobylianskyi R., Yuryk N.* Measurement of heat flux density as a new method of diagnosing neurological disorders in degenerative-dystrophic diseases of the spine // *Modern Methods of Diagnosing Diseases*.-2023.-P. 31-68.
3. *Kobylianskyi R.R., Lysko V.V., Prybyla A.V. et al.* Technological modes of manufacturing thermoelectric sensors for medical purposes // *Journal of Thermoelectricity*.-2023.-**4**.-P. 49-63.
4. *Korop M., Prybyla A., Lysko V., Pylypko V., Khalavka Y.* Computer vision as a tool for correlation analysis of images of the microstructure of Bi-Te-based thermoelectric materials // *Journal of Thermoelectricity*.-2025.-**4**.-P. 64-75.
5. *Wang C., Jiao H., Anatychuk L. et al.* Development of a temperature and heat flux measurement system based on microcontroller and its application in ophthalmology // *Measurement Science Review*.-2022.-**22**.-P. 73-79.
6. *Anatychuk L.I., Kobylianskyi R.R., Lysko V.V. et al.* Method of calibration of thermoelectric sensors for medical purposes // *Journal of Thermoelectricity*.-2023.-**3**.-P. 37-49.
7. *Ring E.F.J., Ammer K.* Infrared thermal imaging in medicine // *Physiological Measurement*.-2012.-**33**.-P. R33-R46.
8. *Perpetuini D., Filippini C., Cardone D., Merla A.* An overview of thermal infrared imaging-based screenings during pandemic emergencies // *International Journal of Environmental Research and Public Health*.-2021.-**18**.-P. 3286.

# Ангармонічна ізінгоподібна модель спін-кросоверних сполук

О.О. Маркін, Ю.В. Гудима

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського, 2,  
Чернівці 58002, Україна  
[markin.oleksandr@chnu.edu.ua](mailto:markin.oleksandr@chnu.edu.ua)

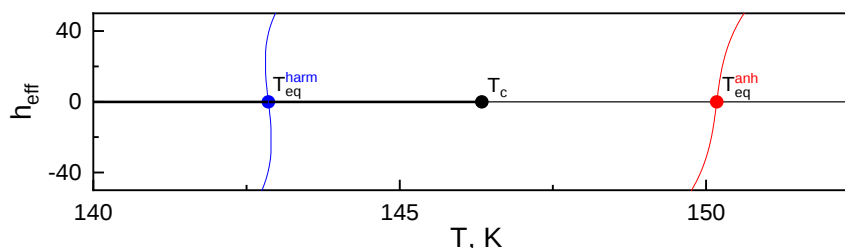
Спін-кросовер сполуки – це комплекси перехідних металів з  $d^4 - d^7$  електронною конфігурацією, у яких відбуваються оборотні переходи між низькоспіновим та високоспіновим станами. Такі переходи відбуваються внаслідок зміни зовнішніх умов: температури, тиску, освітленості, електричного та магнітного полів та ін. Чутливість спін-кросовер сполук до зміни зовнішніх умов визначає їх як перспективну основу для фізичних та хімічних сенсорів.

У роботі запропоновано теоретичну модель для опису явища спін-кросоверу в твердотільних комплексах перехідних металів. Основою запропонованої моделі є розклад в ряд в околі точки механічної рівноваги потенціалу Леннарда-Джонса, залежного від спінових станів, з урахуванням ангармонічного доданку [1].

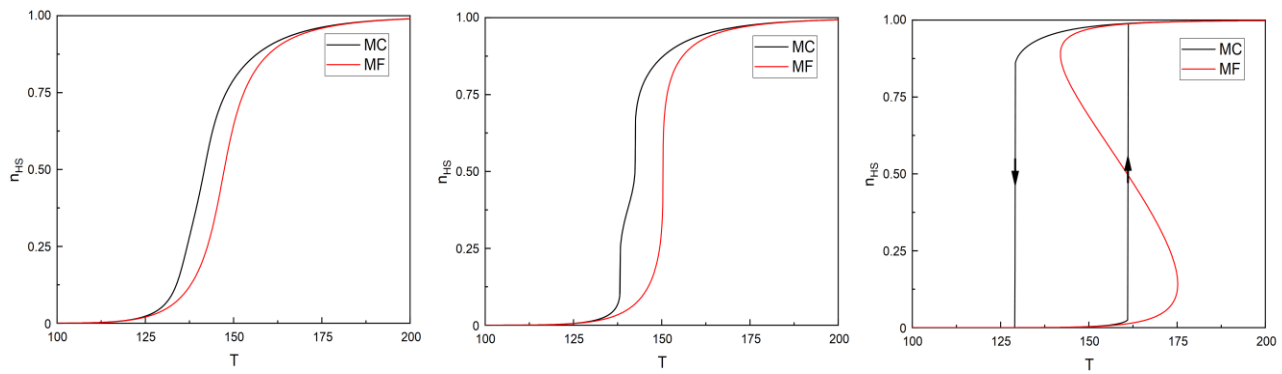
Аналіз гармонічного наближення за допомогою методу середнього поля Вейса передбачає поступові або переходи першого роду, залежно від сили міжмолекулярної взаємодії. Внесок ангармонічних членів приводить до зміщення температури переходу в область вищих температур. Приведено випадок коли молекулярна кристалічна система, яка зазнає фазового переходу у гармонічному наближенні, не демонструє його в ангармонічному наближенні.

Моделювання методом Монте-Карло показує зміщення температури переходів в область нижчих значень, відносно результатів отриманих у наближенні середнього поля [2]. Числове моделювання демонструє двоступеневі переходи у спін-кросоверних кристалах, що підкреслює важливість флуктуацій, які не враховуються у наближенні середнього поля.

Теоретична модель визначає глибину міжмолекулярного потенціалу як ключовий параметр, що контролює кооперативність, а отже гістерезисну поведінку системи, забезпечуючи основу для проєктування спін-кросоверних матеріалів з передбачуваними фізичними властивостями.



**Рис. 1.** Фрагмент фазової діаграми у наближенні середнього поля. При заданих параметрах система у гармонічному наближенні (синя крива) зазнає фазового переходу, на відміну від системи з врахуванням ангармонічних доданків (червона крива).



**Рис. 2.** Порівняння кривих намагніченості (частки високоспінових станів) для різних глибин ям потенціалу (збільшення глибини зліва направо), червоним – наближення середнього поля, чорним – моделювання методом Монте-Карло.

1. Markin, O., Gudyma, Iu. Role of harmonic and anharmonic interactions in controlling the cooperativity of spin-crossover molecular crystals // Phys. Rev. B-2024.-**110**, 174416.
2. Markin, O., Gudyma, Iu. Mean-field theory of spin-crossover transition in elastic molecular crystals with Morse potential energy // Molecular Crystals and Liquid Crystals-2024.-**768**.-P. 1-10.

## Study of the effect of annealing temperature on the polarization properties of polymethyl methacrylate

V.V. Romanchuk, A.V. Samoylov

*V. E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine,  
41, Nauky ave., Kyiv, 03028, Ukraine  
[vladyslav.v.romanchuk@gmail.com](mailto:vladyslav.v.romanchuk@gmail.com)*

Wave plates are widely used to change the polarization state of electromagnetic radiation [1]. For instance, quarter-wave plates ( $\lambda/4$ ) convert linearly polarized light into circularly polarized light and vice versa, while half-wave plates ( $\lambda/2$ ) rotate the plane of polarization by  $90^\circ$ . These wave plates have a wide range of applications in devices utilizing polarized laser radiation. In particular, when conducting spectropolarimetric studies, achromatic and superachromatic wave plates are used, as they retain their polarization properties over a wide wavelength range [2]. Regarding manufacturing, the tolerance for the wave plate components is  $\pm 1^\circ$ . When crystalline plates are produced, for example, from quartz or magnesium fluoride, the thickness of the components must be maintained with an accuracy of  $\pm 15 \mu\text{m}$  and  $\pm 0.11 \mu\text{m}$ , respectively [3]. However, mechanically controlling thickness with such precision is extremely difficult. Therefore, polymethyl methacrylate (PMMA), which can withstand lower accuracy, is currently the most promising material for manufacturing such plates [4].

The production of polymer wave plates involves controlled uniaxial stretching of the polymer to achieve the desired phase shift. Stretching causes the molecules to orient, leading to an ordered polymer state and anisotropy in physical and optical properties [5]. In PMMA, this anisotropy appears as different refractive indices for light polarized parallel and perpendicular to the stretching direction (birefringence). Acrylic stretching near the softening temperature ( $95^\circ\text{C}$  for CO95A PMMA) causes certain technological problems. At such temperatures, stretching is irreversible, so it is not possible to reduce the phase shift mechanically if the plate is overstretched. The anisotropy in finished, uniaxially stretched plates can be reduced by annealing below the softening temperature. Annealing removes internal stresses in the PMMA plate while preserving its geometric dimensions. This work investigates how annealing temperature affects phase shift in uniaxially stretched PMMA.

During the experiment, PMMA samples of different initial degrees of stretching (the phase shift of which is from  $140^\circ$  to  $280^\circ$  at  $20^\circ\text{C}$ ) were annealed (heating was stopped immediately after the sample was brought to the specified temperature) at different temperatures, namely:  $40^\circ\text{C}$ ,  $60^\circ\text{C}$ ,  $80^\circ\text{C}$ ,  $100^\circ\text{C}$ ,  $120^\circ\text{C}$ . Senarmont compensator was used for controlling the phase shift of plates. The experiments showed that when heated to  $40^\circ\text{C}$ , no significant change in the phase shift of the plates was observed, and when a temperature significantly above the softening temperature ( $120^\circ\text{C}$ ) is reached, the plates begin to relax against the direction of stretching and deform. Fig. 1 shows the change value (absolute value of the difference before and after annealing) of the phase shift of the annealed plates in absolute and relative units.

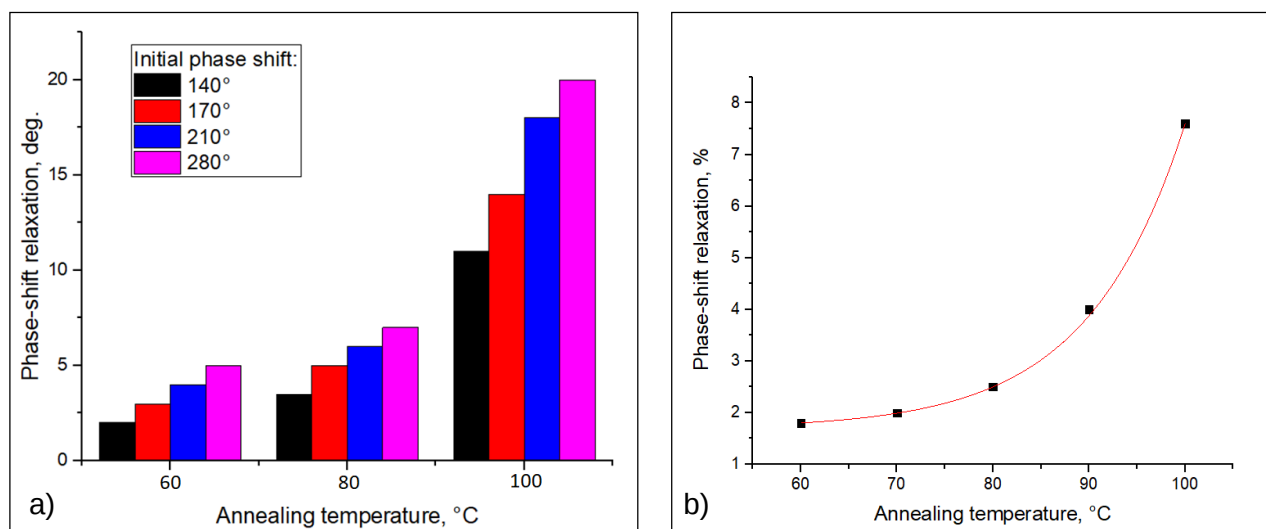


Fig. 1. Phase-shift relaxation behavior of annealed PMMA plates: (a) absolute values; (b) normalized temperature dependence.

According to the obtained results, the magnitude of the phase-shift relaxation depends on the temperature of the preliminary annealing, and for wave plates with different initial phase shifts in the range from 140° to 280° (at 20°C), the dependence is exponential. The obtained results also indicate a quasi-linear relationship between the initial tension and subsequent relaxation of the samples within the studied deformation range. These results will allow for a more controlled relaxation of the finished PMMA polarizing plates. The influence of larger variations in the initial phase shift of the plates and other annealing temperature regimes on the studied effect is the main task for future studies.

1. Gong, Y. *et al.* Research Progress on Terahertz Achromatic Broadband Polarization Wave Plates. *Optics & Laser Technology*. 2023, 166, 109633.
2. Samoylov, A. V. *et al.* Properties of multicomponent achromatic and superachromatic zero-order waveplates. *Journal of Optical Technology*, 2009, 76 (5), 312-315.
3. Samoylov, V. S., Samoylov, A. V. *Waveplates* – Kyiv: MAO, 2015. – 76 p.
4. Dorohoi, D. O. *et al.* Review on Optical Methods Used to Characterize the Linear Birefringence of Polymer Materials for Various Applications. *Molecules*. 2023, 28, 2955.
5. Inoue, T. Strain-Induced Birefringence of Amorphous Polymers and Molecular Design of Optical Polymers. *ACS Appl. Polym. Mater.* 2021, 3, 2264–2273.

## 2D ГІБРИДНІ ПЕРОВСЬКІТИ ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ МАТЕРІАЛИ ДЛЯ ФОТОДЕТЕКЦІЇ У ШИРОКОМУ СПЕКТРАЛЬНОМУ ДІАПАЗОНІ

Сіренко В.Ю.<sup>1</sup>, Кучерів О.І.<sup>1</sup>, Шова С.<sup>2</sup>, Гуральський І.О.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Київський національний університет імені Тараса Шевченка,  
01601, Київ, вул. Володимирська, 64/13; e-mail: valerii\_sirenko@knu.ua

<sup>2</sup> Інститут макромолекулярної хімії «Петру Поні» Академії наук Румунії,  
700487, Яси, алея Грігоре Гіка-Вода, 41-А

Двовимірні органічно-неорганічні гібридні перовськіти (2D-ГОНП) є перспективними матеріалами для сучасної оптоелектроніки завдяки поєднанню високої вологостійкості, можливостей структурного дизайну та цінних для практичного застосування оптоелектронних характеристик. Саме тому 2D-ГОНП знаходять широке застосування як активні шари в фотодетекторах та світлодіодах.[1] Одним із ключових факторів, що обмежує практичне впровадження таких сполук, є значна ширина забороненої зони, яка обмежує спектральний робочий діапазон оптоелектронних приладів, створених на їх основі.

Нам вдалось подолати це обмеження синтезувавши нову серію 2D-ГОНП загального складу  $(\text{L-HisH})_2\text{SnBr}_x\text{I}_{4-x}$  (де L-His = L-гістидин,  $x = 4, 3,37, 1,70, 0,56, 0,44$  та 0). Варіювання співвідношення Br/I дає змогу передбачувано змінювати ширину оптичної забороненої зони даних сполук (Рис. 1а). Зокрема, зміна ширини забороненої зони в інтервалі 1,82–3,05 еВ забезпечує перекриття практично всього видимого діапазону. Особливий інтерес становить йодидна сполука, для якої зафіксовано аномально вузьку заборонену зону (1,82 еВ), що є нетиповим для двовимірних перовскітів. Як “proof-of-concept” було створено прототип фотодетектора, в якому як активний шар був використаний  $(\text{L-HisH})_2\text{SnI}_4$  (Рис. 1б). Для отриманого прототипу детекція світла спостерігається діапазоні від 200 до 800 нм, що є рекордним значенням для фотодетекторів на основі 2D-ГОНП. Отримані результати підтверджують ефективність галогенідного заміщення як інструменту керування оптичними властивостями гібридних перовскітів, а також перспективність використання катіонів амінокислот для створення матеріалів із налаштовуваними оптоелектронними характеристиками. Такі сполуки можуть знайти застосування у фотодетекторах, сонячних елементах, світлодіодах та фототранзисторах.

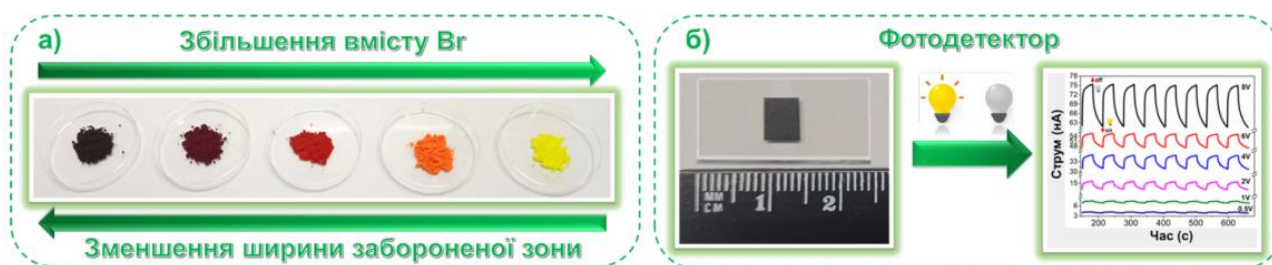


Рис. 1 (а) – Фотографії серії гібридних перовскітів складу  $(\text{L-HisH})_2\text{SnBr}_x\text{I}_{4-x}$ ; (б) – Фотодетектор ультрафіолетового, видимого та ближнього інфрачервоного світла на основі 2D-ГОНП  $(\text{L-HisH})_2\text{SnI}_4$  як активного шару.

1. Sirenko V. Y., Kucheriv O. I., Shova S., Gural'skiy I. A. Histidine-based hybrid perovskites as promising materials for wide wavelength photodetection // Appl. Mater. Today.-2024.-41.-P. 102452.

## **Секція 3**

**Фотовольтаїка та енергозбереження**

**Photovoltaics and Energy Efficiency**

## Особливості генерації носіїв заряду в монокристалах $\text{MAPbI}_3$ під дією високоенергетичного іонізуючого випромінювання

В.А. Коломієць, О.І. Віра, В.Б. Капустяник

*Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Драгоманова, 50, Львів 79005, Україна*

*Volodymyr.Kolomiets@lnu.edu.ua*

Монокристали органічно-неорганічного перовськіту  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  ( $\text{MAPbI}_3$ ) привертають увагу як перспективний матеріал для створення радіовольтаїчних елементів завдяки поєднанню сцинтиляційних, фотоелектричних і сегнетоелектричних властивостей. Важливою передумовою реалізації як фотовольтаїчного, так і радіовольтаїчного ефекту є переведення кристала з вихідного антисегнетоелектричного стану в сегнетоелектричний під дією інтенсивного ультрафіолетового опромінювання [1]. Саме в такому стані в кристалі формується спонтанна поляризація, яка створює внутрішнє електричне поле та забезпечує умови для виникнення стабільного фотоелектричного відгуку. За X-променевого збудження генерація носіїв заряду в  $\text{MAPbI}_3$  має складний характер і охоплює як пряме перетворення енергії іонізуючого випромінювання у вільні електрони та дірки, так і додаткову фотогенерацію, пов'язану з екситонною X-променевою люмінесценцією.

Суттєвою особливістю досліджуваного матеріалу є те, що екситонне випромінювання виникає поблизу краю власного поглинання, у спектральній області відносної прозорості кристала. Це створює умови для повторного поглинання сцинтиляційного випромінювання в об'ємі зразка і, відповідно, для додаткового внеску у загальний фотоелектричний відгук. Такий механізм набуває особливого значення за низьких температур, коли інтенсивність екситонної X-променевої люмінесценції зростає. Одночасно зі зниженням температури послаблюється вплив йонної провідності, яка при кімнатній температурі частково екранує поляризаційне поле та зменшує ефективність просторового розділення носіїв заряду.

Отже, монокристали  $\text{MAPbI}_3$  можна розглядати як основу для радіовольтаїчних елементів нового типу, в яких перетворення енергії випромінювання визначається поєднанням сегнетоелектричного впорядкування, сцинтиляційних процесів і внутрішнього фотовольтаїчного механізму [2]. Такий підхід є перспективним для створення простіших за конструкцією джерел живлення, зокрема для застосувань у спеціалізованих системах, що працюють в умовах низьких температур або тривалого впливу іонізуючого випромінювання.

1. Kapustianyk V., Kolomiets V., Eliyashevskyy Y., Uhrynovych O. Photovoltaic effect in methylammonium lead triiodide single crystal // J Phys Condens Matter.-2025.-**37**, N 4.-P. 045705.
2. Kapustianyk V., Kolomiets V., Eliyashevskyy Y., Uhrynovych O., Mykhaylyk V., Zia W., Saliba M. X-ray-voltaic Effect in the Single Crystals of  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  Perovskite // ACS Appl Mater Interfaces.-2025.-**17**, N 45.-P. 62152-62161

# Вплив рельєфу, географічних та кліматичних умов на ефективність сонячних панелей

Т.Г. Коляджин, Т.М. Мазур

<sup>1</sup> Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 64, Київ 01033, Україна

[email.of.corresponding\\_author@server.com](mailto:email.of.corresponding_author@server.com)

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

Зростання енергоспоживання та необхідність зменшення викидів парникових газів стимулюють розвиток відновлюваної енергетики. Одним із найбільш перспективних напрямів є використання фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії. Ефективність роботи сонячних електростанцій визначається як властивостями фотоелектричних матеріалів, так і зовнішніми природними умовами, зокрема рельєфом, географічним положенням та кліматичними факторами. Метою роботи є аналіз впливу природних умов на ефективність функціонування сонячних панелей.

Одним із основних параметрів, що визначає продуктивність фотоелектричних систем, є сонячна інсоляція - потік сонячного випромінювання, що досягає поверхні Землі. У стандартних умовах тестування (STC) густина випромінювання становить 1000 Вт/м<sup>2</sup>, температура фотоелемента 25 °С, а спектральний склад відповідає стандарту Air Mass 1.5 (AM1.5), який характеризує середню довжину шляху сонячного випромінювання в атмосфері при куті падіння променів приблизно 48° [1].

Спектр сонячного випромінювання охоплює діапазон від ультрафіолетового до інфрачервоного. Для кремнієвих фотоелементів найбільш ефективним є спектральний інтервал 400–1100 нм (рис. 1), у якому енергія фотонів перевищує ширину забороненої зони кремнію ( $E_g \approx 1.12 \text{ eV}$ ), що забезпечує генерацію електрон-діркових пар [2].

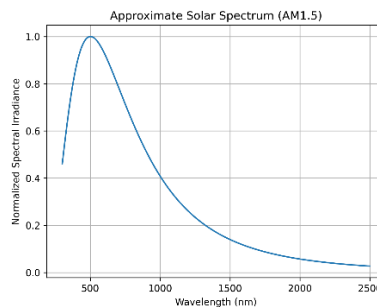


Рис. 1. Спектральний розподіл сонячного випромінювання для стандартних умов AM1.5 у діапазоні 300–2500 нм.

Ефективність фотоелектричних перетворювачів характеризується коефіцієнтом корисної дії (ККД), який характеризує частку сонячної енергії, що перетворюється в електричну:

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{V_m I_m}{GA}$$

де  $V_m$  та  $I_m$  – напруга та струм у точці максимальної потужності,  $G$  – густина сонячного випромінювання (Вт/м<sup>2</sup>),  $A$  – площа фотоелемента.

Важливим фактором є атмосферна маса (Air Mass), яка характеризує довжину шляху сонячного випромінювання в атмосфері. Зі збільшенням атмосферної маси посилюються процеси поглинання та розсіювання випромінювання, що призводить до зменшення інтенсивності сонячної радіації на поверхні Землі [3].

Рельєф місцевості також впливає на ефективність фотоелектричних систем. У Північній півкулі найбільш сприятливими є південні схили, що забезпечують максимальне надходження сонячного випромінювання. Оптимальний кут нахилу сонячних панелей наближений до географічної широти місцевості. Для території Івано-Франківської області він становить приблизно  $35\text{--}40^\circ$ . Відхилення від оптимального кута може зменшувати річне вироблення електроенергії на  $3\text{--}5\%$ . Кліматичні фактори, зокрема температура, істотно впливають на електричні параметри фотоелементів. Номінальна потужність модулів визначається при температурі  $25^\circ\text{C}$ , тоді як підвищення температури призводить до зниження ефективності.

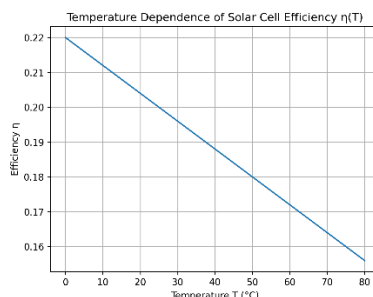


Рис. 2. Температурна залежність ефективності кремнієвого фотоелемента  $\eta(T)$ .

Температурний коефіцієнт для кремнієвих фотоелементів становить приблизно  $-0.4\text{--}-0.5\%$ /°C. Це означає, що при підвищенні температури на кожен градус потужність модуля зменшується приблизно на  $0.45\%$ . Наприклад, при нагріванні панелі до  $65^\circ\text{C}$  зниження потужності може становити близько  $18\%$ .

Сучасні кремнієві фотоелектричні модулі мають коефіцієнт корисної дії  $18\text{--}23\%$ , тоді як для тонкоплівкових фотоелементів цей показник зазвичай становить  $10\text{--}18\%$ . Реальна продуктивність сонячних електростанцій визначається комплексним впливом фізичних характеристик фотоелементів та природних умов їх експлуатації.

Підсумовуючи, зазначимо, що ефективність фотоелектричних систем значною мірою визначається природними умовами розміщення, зокрема рельєфом місцевості, географічною широтою та кліматичними факторами. Оптимальна орієнтація та кут нахилу сонячних панелей дозволяють підвищити ефективність використання сонячної енергії та зменшити втрати виробленої електроенергії. Підвищення температури фотоелементів призводить до зниження їхньої ефективності через зміну електричних параметрів напівпровідникових структур.

Комплексний облік природних факторів є важливим етапом проєктування сонячних електростанцій та дозволяє оптимізувати їхню енергетичну продуктивність.

1. Mazur T.M., Prokopiv V.V., Mazur M.P., Pysklynets U.M. Solar cells based on CdTe thin films // *Physics and Chemistry of Solid State*.-2021.-22, N 4.-P. 817–827.  
<https://doi.org/10.15330/pcss.22.4.817-827>.
2. Green M.A. Solar Cells: Operating Principles, Technology and System Applications // Prentice-Hall.-2012.- P.274.
3. Nelson J. The Physics of Solar Cells // Imperial College Press. -2012.- P.274.

## Вуглецеві підкладки як перспективний компонент органічно-неорганічних гібридів для фотоелектричного застосування

Д.А. Кузнєцова<sup>1</sup>, С.В. Мамикін<sup>1</sup>, П.С. Смертенко<sup>1</sup>, Н. М. Рощина<sup>1</sup>, В.З. Барсуков<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, проспект Науки, 41, Київ, 03028, Україна

[d.kuznietsova@isp.kiev.ua](mailto:d.kuznietsova@isp.kiev.ua)

<sup>2</sup> Інститут Сорбції та Проблем Ендоекології НАН України, вул. Олега Мудрака, 13, Київ, 03164, Україна

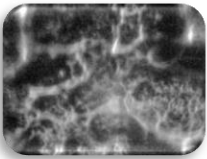
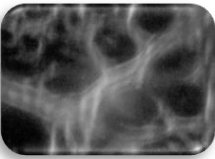
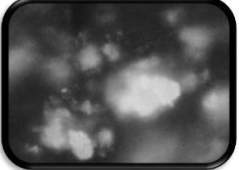
Нагальна потреба у пошуку альтернативних матеріалів замість кремнієвих підкладок залишається актуальною, особливо в контексті створення гібридних органічно-неорганічних сонячних елементів [1]. Вуглець є одним із матеріалів-кандидатів на заміну кремнію, проте набагато дешевшим. У цьому дослідженні тонкоплівкові вуглецеві підкладки використовували як шари, на яких здійснювалася самоорганізація гетероциклічних сполук [1]. Процес самоорганізації органічної речовини на композитних вуглецевих плівках досліджували з метою аналізу оптимальної морфології в залежності від складу підкладки, що сприяє подальшому розвитку органічно-неорганічних гібридів та підвищенню ефективності сонячних елементів на їх основі.

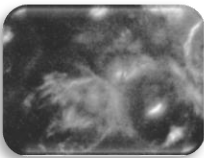
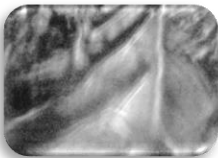
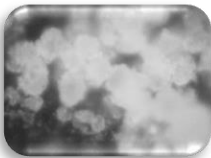
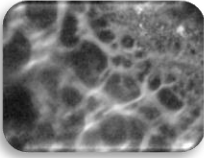
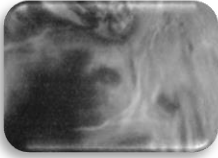
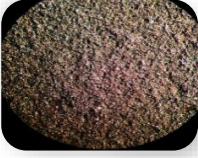
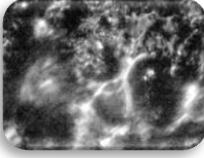
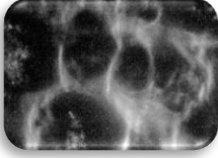
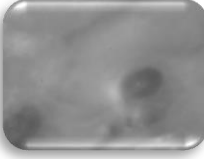
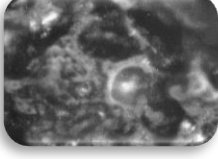
Основними компонентами підкладки слугували сажа РВ, активоване вугілля, графен та три види графіту: КГПС-1, КП, ГАК. Також додатково вводились ПВБ, порошок Ні та руда. Всі співвідношення речовин наведено у таб.1. В якості органічних речовин використовували сульфацил натрію, клонідин та ціанокобаламін, які належать до класу гетероциклічних амінів. Органічні матеріали наносили на активовані вуглецеві підкладки методом крапельного осадження при кімнатній температурі.

Оптичні зображення морфології поверхні клонідину гідрохлориду на вуглецевих підкладках представлені в таб. 1.

Дослідження показало, що для сульфацилу натрію присутність графену не сприяла формуванню комірчастих сітчастих структур. Водночас для клонідину гідрохлориду наявність цих домішок виявилася несуттєвою і не перешкоджала утворенню комірчастої сітчастої морфології. Для плівок ціанокобаламіну на всіх досліджуваних підкладках незмінно спостерігалася кластерна морфологія.

Таблиця №1 Морфологія отриманих плівок органічних речовин на карбонових підкладках

| Склад підкладки                                                            | СЕМ-зображення вуглецевих підкладок                                                                | Сульфацил натрію                                                                    | Клонідину гідрохлориду                                                               | Ціанокобаламіну (Вітамін В12)                                                         |
|----------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| 20 % сажі РВ<br>20 % активоване вугілля<br>40 % графіту КГПС-1<br>20 % ПВБ | <br>Опір 4,0 Ом |  |  |  |

|                                                                             |                                                                                                    |                                                                                     |                                                                                      |                                                                                       |
|-----------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| 22,22 % сажі РВ<br>55,6 % графіту ГАК-1<br>2,22 % графен G250-H<br>20 % ПВБ | <br>Опір 3,3 Ом   |    |    |    |
| 20 % сажі РВ<br>50 % графіту ГАК-1<br>10 % графен хGnP-C=750<br>20 % ПВБ    | <br>Опір 3,6 Ом   |    |    |    |
| 16,67 % сажі РВ<br>50 % графіту К П<br>16,67 % руди<br>16,67 % ПВБ          | <br>Опір 3,4 Ом  |   |   |   |
| 16,67 % сажі РВ<br>50 % графіту К П<br>16,67 % порошок Ні<br>16,67 % ПВБ    | <br>Опір 3,9 Ом |  |  |  |

Результати дослідження дозволили з'ясувати послідовність формування органічних плівок на карбонових підкладках залежно від складу вуглецю: найбільш ефективними виявилися графіт КГПС-1 (№1), графіт КП (№4) та графіт ГАК (№3). Встановлено, що додавання графену (підкладки №2 та №3) і особливо нікелевого порошку (підкладка №5) не сприяє формуванню цільової сітчастої морфології.

1. W.A. Khan, *et al.*, “Carbon nanomaterials in coatings: A review focusing thin film photovoltaic solar cells”, *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2025, vol. 185, p. 108929
2. P. Smertenko, V. Barsukov *et al.* Self-Organized Heterocyclic Amines Films on Carbon Substrates for Photovoltaic Applications. *Appl. Sci.* 2022, 12(20), 10210

## **Секція 4**

**Напівпровідникова ІЧ- і НВЧ- техніка**

**Semiconductor infrared and microwave  
technology**

## Influence of Ion Implantation on the Structural and Morphological Properties of HgCdTe Epitaxial Layers

Anna Yevmenova, Zinoviia Tsybrii, Fedir Sizov, Petro Lytvyn, Kateryna Svezhentsova, Oleksandr Gudymenko, Mykola Vuichyk, Oleksandr Kosulya, Kateryna Andrieieva

*V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 41 Nauky Avenue, Kyiv 03680, Ukraine*  
[evmenova\\_a@ukr.net](mailto:evmenova_a@ukr.net)

Mercury cadmium telluride ( $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ , MCT) remains one of the most promising semiconductor materials for high-performance infrared (IR) detectors and focal plane arrays due to its tunable bandgap and excellent photoelectric properties. Ion implantation is widely used for the formation of p - n junctions in MCT-based photodiodes [1, 2]. However, this process may introduce structural defects and lattice distortions that influence device performance. Therefore, understanding implantation-induced structural changes is essential for optimizing fabrication technologies of MCT-based IR detectors.

In this work, the effects of  $\text{B}^+$ ,  $\text{Be}^+$ ,  $\text{Al}^+$ , and  $\text{Ag}^+$  ion implantation on the structural and morphological properties of p-type  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  ( $x \approx 0.28$ ) epitaxial layers grown by liquid-phase epitaxy on  $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$  (111)B substrates were investigated. Ion implantation was carried out at an energy of 100 keV with a dose of  $3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . Surface morphology, depth profiles of implanted ions, and crystalline quality were studied using atomic force microscopy (AFM), secondary ion mass spectrometry (SIMS), and high-resolution X-ray diffraction (HRXRD).

AFM measurements revealed a strong dependence of surface morphology on the mass of implanted ions (Figure 1). Implantation with light ions ( $\text{Be}^+$  and  $\text{B}^+$ ) resulted in significant surface planarization and reduction of the root-mean-square (RMS) roughness from 4.2 nm for the pristine surface to approximately 1.0-1.2 nm. In contrast, heavier ions ( $\text{Al}^+$  and  $\text{Ag}^+$ ) preserved or slightly increased the surface roughness due to grain coarsening and localized damage formation.

SIMS depth profiling confirmed substantial differences in the projected ranges of implanted ions. The penetration depth reached approximately 630 nm for  $\text{Be}^+$  ions and about 80 nm for  $\text{Ag}^+$  ions. The experimental profiles also demonstrated extended tails compared with SRIM simulations, which can be attributed to ion channeling effects in the crystalline HgCdTe structure [3].

High-resolution X-ray diffraction analysis revealed implantation-induced structural modifications in the epitaxial layers. The primary structural effect for all implanted samples was an increase in mosaicity and microstrain rather than a significant change in the average lattice parameter.  $\text{Ag}^+$  implantation produced the largest out-of-plane lattice strain, whereas  $\text{Al}^+$  implantation led to the highest mosaic broadening. In contrast,  $\text{B}^+$  implantation resulted in the formation of tilted domains and satellite peaks in the rocking curves, indicating the development of mosaic structures with significant tilt distribution.

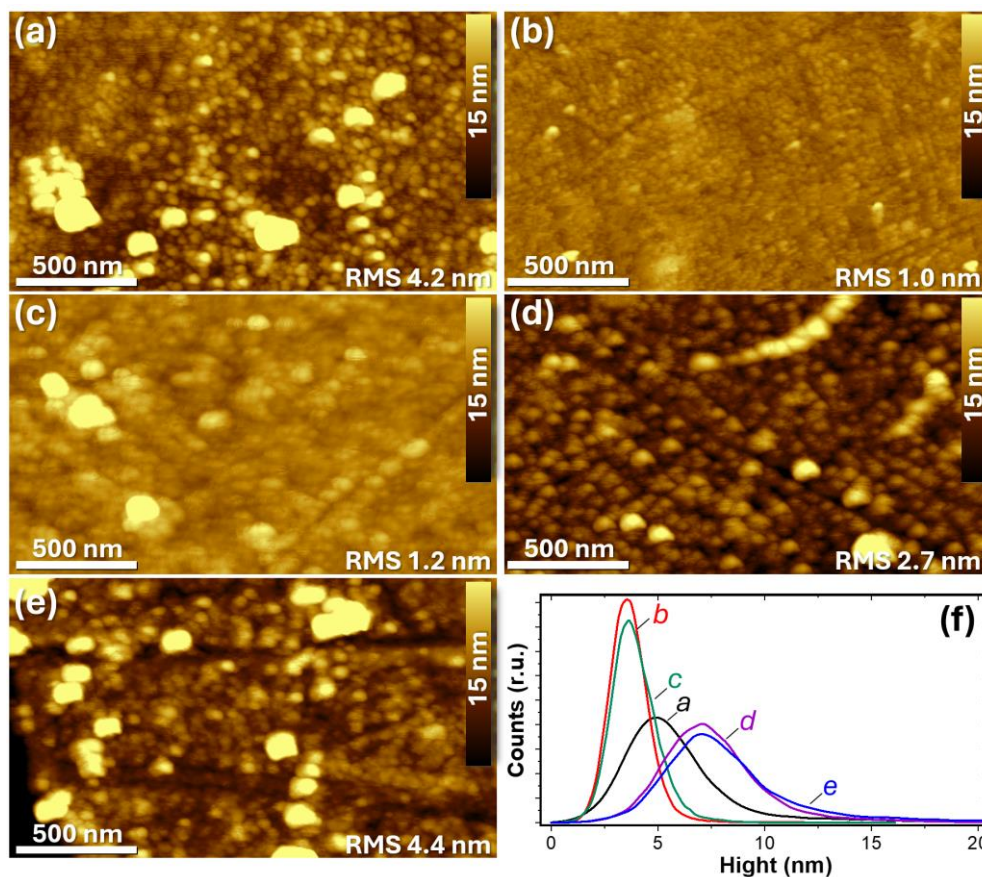


Fig. 1. AFM topography maps of the MCT film surface: unimplanted (a) and implanted with  $\text{Be}^+$ ,  $\text{B}^+$ ,  $\text{Al}^+$  and  $\text{Ag}^+$  ions (b, c, d, e, correspondingly). Height histograms (f).

The obtained results demonstrate that ions mass and penetration depth strongly influence the structural response of  $\text{HgCdTe}$  epitaxial layers to implantation. These findings provide important guidelines for selecting optimal implantation parameters for the fabrication of MCT-based infrared photodetectors while maintaining high crystalline quality.

#### Acknowledgements

This work was partially supported by the National Academy of Sciences of Ukraine (projects #0125U000799, #0125U000109Д and III-10-24). K. Svezhentsova thanks for funding the National Research foundation of Ukraine, grant # 2023.05/0022.

1. L. O. Bubulac, W. E. Tennant, D. S. Lo, *et al*, Ion implanted junction formation in  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ , J. Vac. Sci. Technol. A. 5 (1987) 3166–3170. <https://doi.org/10.1116/1.574861>.
2. L. O. Bubulac, W. E. Tennant, S. H. Shin, *et al.*, Ion implantation study of  $\text{HgCdTe}$ , Jpn. J. Appl. Phys.. 19 (1980) 495–500. <https://doi.org/10.7567/JJAPS.19S1.495>.
3. S. Radovanov, L. Godet, 2007. Low energy ion implantation using non-equilibrium glow discharge. J. Phys.: Conf. Series, 71, 012014. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/71/1/012014>.

## Лазерно-індуковані зміни фотоелектричних параметрів CZT

М.С. Кузнецов,<sup>1</sup> С.М. Левицький<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ТОВ Радіонікс, Київ, Україна

[levytskyi@ua.fm](mailto:levytskyi@ua.fm)

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

Матеріали на основі твердих розчинів  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$  (CZT) є ключовими елементами сучасної оптоелектроніки та детекторної техніки завдяки їхній високій чутливості у широкому спектральному діапазоні. Однак ключова проблема полягає в тому, що їхні фотоелектричні характеристики суттєво залежать від структурної досконалості кристалічної ґратки та наявності власних дефектів. Традиційні методи синтезу та обробки не завжди дозволяють досягти оптимального співвідношення чутливості, швидкодії та рівня шумів, що обмежує ефективність приладів на їхній основі.

Актуальність дослідження зумовлена необхідністю пошуку ефективних способів цілеспрямованої модифікації властивостей  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ . Використання імпульсного лазерного випромінювання є перспективним інструментом для розв'язання цієї задачі, оскільки дозволяє локально впливати на матеріал, змінювати його дефектну структуру та, як наслідок, керувати фотоелектричними параметрами.

На отримання «ідеальних» характеристик напівпровідникових детекторів найбільше впливає стан та якість обробки поверхні (механічної, хімічної, лазерної), а також структурна досконалість приповерхневих шарів. Основною технологічною проблемою у виготовленні CZT-детекторів є обробка поверхні кристала та формування електричних контактів метал-напівпровідник із заданими властивостями: омичних або бар'єрних, механічно міцних та електрично стабільних. Ефективність контакту залежить як від вибору металу електрода, так і від якості підготовки поверхні перед нанесенням. Параметри контакту можуть бути змінені різними методами обробки кристалів під час та після осадження електродів. Поверхневі властивості кристалів впливають на багато аспектів ефективності діодної структури: зокрема, максимальна прикладена напруга часто обмежується поверхневою провідністю.

Опромінення кристалів CZT наносекундними імпульсами лазера дозволяє змінювати структуру і морфологію поверхневої області. Для контролю стану поверхні вимірюються спектри фотопровідності (ФП) до і після опромінення. Спектроскопія фотовідгуку є ефективним методом дослідження, чутливим до змін стану поверхні, дефектної системи та енергетичної зонної структури напівпровідників.

У даній роботі досліджується вплив хімічної обробки та наносекундних імпульсів лазерного випромінювання на стан поверхні і фотоелектричні властивості кристалів CZT, а також аналізується оптимізація технологічного процесу обробки цього матеріалу.

Дослідження проводилися на зразках твердих розчинів  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$  ( $x=0,1$ ) розміром  $5 \times 5 \times 1$  мм<sup>3</sup>. Спектри фотопровідності вимірювалися на установці на базі монохроматора МДР-3.

Хімічна обробка поверхні включала: промивання в ацетоні (3-5 хв.) для видалення забруднень; промивання в метанолі (5 хв.); травлення у 3% розчині Br у HBr (швидкість 20 мкм/хв., час 1,5 хв.); послідовне промивання в метанолі у двох різних посудинах (по 5 хв.).

Із аналізу спектрів пропускання в області фундаментального оптичного переходу  $E_0$  визначено енергію переходу — 1,51 еВ (довжина хвилі 820 нм). За літературними даними,  $E_0$  для CZT при  $T=300$  К знаходиться в межах 1,51–1,58 еВ. Відмінності у ширині забороненої

зони зумовлені складною енергетичною структурою, технологічними умовами вирощування та методикою вимірювань.

Наступним етапом було нанесення індієвих (In) електродів методом термічного осадження на одну з граней напівпровідника. Міжконтактна область опромінювалася при  $T=300$  К імпульсами неодимового лазера ( $\lambda=532$  нм,  $\tau=7-8$  нс) із густиною енергії  $E$  від 34,4 до 142,27 мДж/см<sup>2</sup> (варіювалася відносно порогу плавлення).

Спектри ФП: зразок з двома омичними контактами під'єднувався до джерела зсуву  $V_0$  через опір навантаження  $R_n$ . Товщина зразка забезпечувала поглинання практично всього світла  $W_0(1-r)$ , що пройшло через освітлену поверхню.

Вихідні спектри фотопровідності кристалів CZT мали типову  $\Delta$ -подібну форму, що свідчить про значний вплив поверхневої рекомбінації в області сильного поглинання.

Опромінення кристалів імпульсами лазера у певному діапазоні енергій призвело до: збільшення сигналу фотопровідності та підвищення короткохвильового крила спектрів. Це підтверджує зменшення швидкості поверхневої рекомбінації внаслідок лазерної очистки поверхні, десорбції оксидів та відпалу структурних дефектів.

Зростання загальної фоточутливості, що пов'язано з лазерно-стимульованою сегрегацією домішок та точкових дефектів у стоки (дислокації, протяжні дефекти).

Короткохвильового зсуву максимуму спектрів, що є доказом формування приповерхневого шару з ширшою забороненою зоною внаслідок зміни компонентного складу.

При збільшенні інтенсивності лазерних імпульсів понад оптимальний рівень спостерігалися протилежні ефекти:

- зростання швидкості поверхневої рекомбінації;
- зниження фоточутливості.

Це зумовлено збільшенням концентрації точкових дефектів структури та незворотними змінами у приповерхневій області (руйнування кристалічної структури, плавлення приповерхневого шару). У таких випадках максимум і червоний край спектру зсувалися в короткохвильову область через лазерне випаровування атомів Cd з поверхні та формування шару з підвищеною концентрацією цинку.

У роботі експериментально підтверджено, що обробка високоомних кристалів CZnTe імпульсним неодимовим лазером є ефективним методом керованої модифікації їх фотоелектричних властивостей. Встановлено оптимальний діапазон густини енергії лазерного випромінювання, який дозволяє: покращити стан поверхні;

- збільшити фоточутливість матеріалу;
- зменшити швидкість поверхневої рекомбінації;
- забезпечити легування тонких приповерхневих областей.

Перевищення порогових значень густини енергії призводить до деградації фотоелектричних характеристик через утворення радіаційних дефектів та порушення структурної досконалості поверхневого шару. Отримані результати можуть бути використані для оптимізації технологічного процесу виготовлення чутливих елементів детекторів на основі  $Cd_{1-x}Zn_xTe$ .

# Вимірювання діаграми спрямованості пірамідальної рупорної антени та HRFZ-Si лінзи для оптимізації ТГц випромінювання у системах із позаосьовими параболічними дзеркалами

Шекера А.Ю., Лисюк І.О.

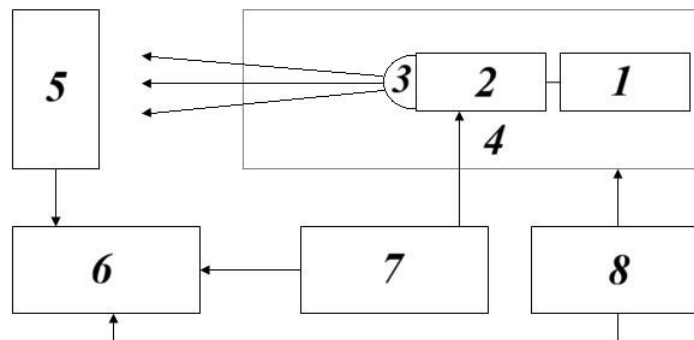
*Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарівського НАН України,  
03028, Київ, пр. Науки 41  
[andrii.sheker@isp.kiev.ua](mailto:andrii.sheker@isp.kiev.ua)*

Рупорні антени та лінзи з високоомного кремнію (HRFZ-Si) широко використовують в приладах технічного бачення інфрачервоного та терагерцового (ТГц) діапазонів спектру [1-3], та мають, зокрема, перспективи застосування в системах 6G зв'язку.

Через низьку потужність ТГц-джерел (10–100 мВт) та їхню виражену частотну залежність, критично важливо забезпечити максимальне фокусування випромінювання за допомогою рупорних антен або лінз [4].

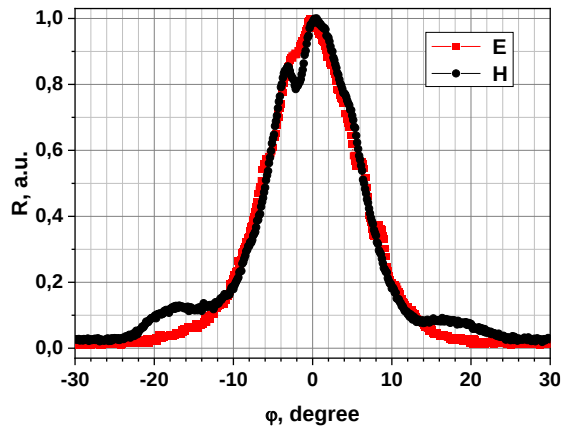
Задачі проектування терагерцових систем з позаосьовими параболічними дзеркалами чи іншими оптичними елементами вимагають знання діаграми спрямованості випромінювачів.

Розроблено і виготовлено пірамідальні рупорні антени та HRFZ-Si лінзи, для використання в системі з позаосьовими параболічними дзеркалами для налаштування ТГц зв'язку. Для вимірювання діаграми спрямованості в площині за густиною потоку потужності використано схему, що наведена на рис. 1.

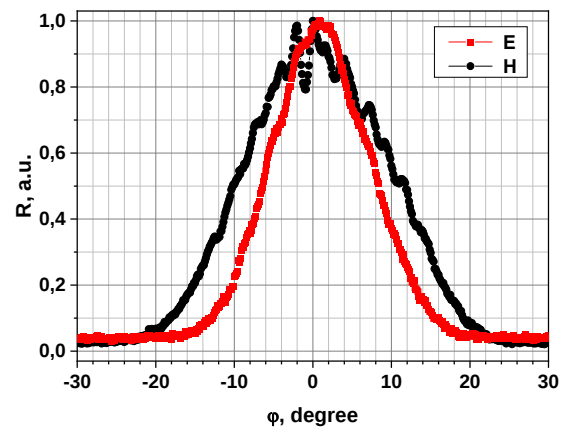


**Рис. 1.** Схема установки для вимірювання діаграми спрямованості рупорних антен та лінз: 1 – генератор 140 ГГц лавино-пролітний діод; 2 – електричний модулятор сигналу; 3 – досліджувана HRFZ-Si лінза (або рупорна антена); 4 – поворотна платформа, 5 – приймач випромінювання МГ-30; 6 – синхронний детектор SR-830; 7 – генератор для керування модуляцією сигналу Agilent 33250A; 8 – ПК.

Виміряні нормовані діаграми спрямованості в Е- і Н- площинах для пірамідальної рупорної антени та для HRFZ-Si лінзи представлено на рис. 2 і рис. 3. Кут між антеною і приймачем змінювався від  $-45^\circ$  до  $+45^\circ$  з кроком  $0,25^\circ$ , діаграма приведена для кутів від  $-30^\circ$  до  $+30^\circ$ .



**Рис.2.** Нормовані діаграми спрямованості в Е- та Н- площинах для пірамідальної рупорної антени



**Рис.3.** Нормовані діаграми спрямованості в Е- та Н- площинах для HRFZ-Si лінзи

Застосована методика дозволяє вимірювати діаграму спрямованості рупорних антен і HRFZ-Si лінз в Е- та Н- площинах, а також оцінювати ширину їхньої діаграми спрямованості.

Отримані розподіли були апроксимовані функцією Гауса і використані для побудови моделі випромінювача в оптичній програмі Ansys OpticStudio.

Ширина діаграми спрямованості для HRFZ-Si лінзи на рівні 0,1 більша порівняно з пірамідальною рупорною антеною на  $4^\circ$  для Е-площини та на  $14^\circ$  для Н-площини. Як наслідок, при роботі з позаосьовим параболічним дзеркалом MPD249-G01 рупорна антена працює ефективніше (91,5% проти 76,8%), мінімізуючи втрати енергії на додаткові 14,7%.

Проведена робота має практичне значення для розробників ТГц-систем бездротової передачі даних з використанням позаосьових дзеркал. Узгодженість елементів джерело – рупор – дзеркало та джерело – лінза – дзеркало демонструє один з можливих методів збільшення ефективності, і, відповідно, дальності передачі даних, що є актуальним при використанні малопотужних компактних ТГц-джерел випромінювання.

1. Nissanov, U., Singh, G. Terahertz Antenna Technologies for 6G Communication Systems. In: Antenna Technology for Terahertz Wireless Communication// Springer, Cham. -2023. P. 83–110.
2. Llombart N., Chattopadhyay G., Skalare A., Mehdi I. Novel terahertz antenna based on a silicon lens fed by a leaky wave enhanced waveguide// IEEE Trans. Antennas Propag. -2011. -59, N 6. -P. 2160–2168.
3. Rappaport T.S., Xing Y., Kanhere O. et al. Wireless communications and applications above 100 GHz: Opportunities and challenges for 6G and beyond// IEEE Access. -2019. -7. -P. 78729–78757.
4. Y. Huang, Y. Shen and J. Wang. From Terahertz Imaging to Terahertz Wireless Communications// Engineering. -2023. 22. -P. 106-124

## **Секція 5**

***Перспективні та інноваційні розробки***

***Promising and innovative developments***

## Influence of size and interfacial effects on the electrophysical properties of ferroelectric nanocomposites

O.V. Bereznykov<sup>1</sup>, D.O. Stetsenko<sup>1</sup>, O.S. Pylypchuk<sup>1</sup>, E. A. Eliseev<sup>2</sup>, A.N. Morozovska<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, 46 Nauky Avenue, 03028 Kyiv, Ukraine*

[alexber36@gmail.com](mailto:alexber36@gmail.com)

<sup>2</sup> *Frantsevich Institute for Problems in Materials Science, National Academy of Sciences of Ukraine Omeliana Pritsaka str., 3, Kyiv, 03142, Ukraine*

We considered a system consisting of a densely packed array of ferroelectric nanowires arranged in a polymer matrix (Fig. 1). The composite was placed between two electrodes, to which a voltage change was applied. The nanowires touch both each other and the electrodes. Calculations of the electric potential and field distributions, polarization, equilibrium domain structures, dielectric constant and electrocaloric response of the nanocomposite were carried out using finite element modeling (FEM) using the phenomenological Landau-Ginsburg-Devonshire approach together with electrostatic equations and the theory of elasticity.

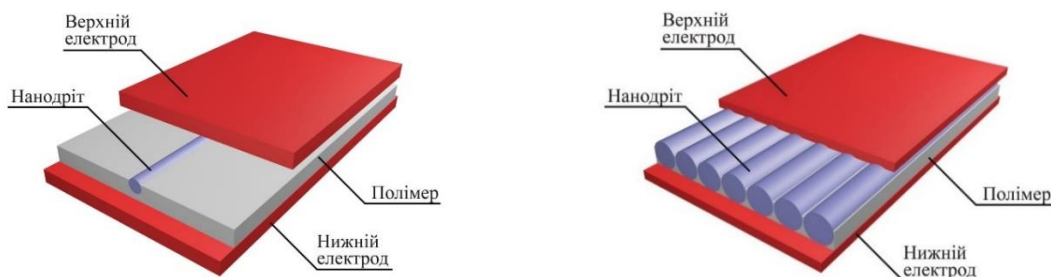


Fig. 1. Schematic representation of the systems that were modeled: (a) one nanowire in a polymer capacitor, (b) nanocomposite.

The contribution of size and interfacial effects, as well as dipole-dipole interaction, was investigated by varying the nanowire radius  $R$  (from 2 to 20 nm) and the dielectric constant of the matrix  $\epsilon_s$  (from 1 to 300). The nanowires, which initially had a random polarization distribution, transitioned to stable states depending on their size and the dielectric constant of the matrix. The influence of dipole-dipole interaction was investigated by comparing the phase diagrams of the average, maximum and minimum polarization of the nanowire, both for a single wire (absence of neighbors) and an array of nanowires (see Fig. 2). Based on the MFE results, we identified 4 such states: paraelectric, polydomain, single-domain and mixed ferroelectric states. The mixed state is a region of coexistence of poly- and single-domain states, and is characterized by non-zero spontaneous polarization in the middle of an individual nanowire. It has been shown that the transition from ferroelectric to paraelectric phase occurs when the wire radius is reduced below the critical radius  $R_{cr}$ , which depends on  $\epsilon_s$ . At large values of  $\epsilon_s$ , the size-induced phase transition does not occur due to the high degree of dielectric shielding. Size-dependent phase transitions are observed in the dependences of the polarization, dielectric permittivity, and electrocaloric coefficient on the nanowire radius. The distribution of local permittivity in the middle of an individual nanowire demonstrates the presence of zones with a negative value of local permittivity, which can be used in the design of field-effect transistors to reduce subthreshold swing.

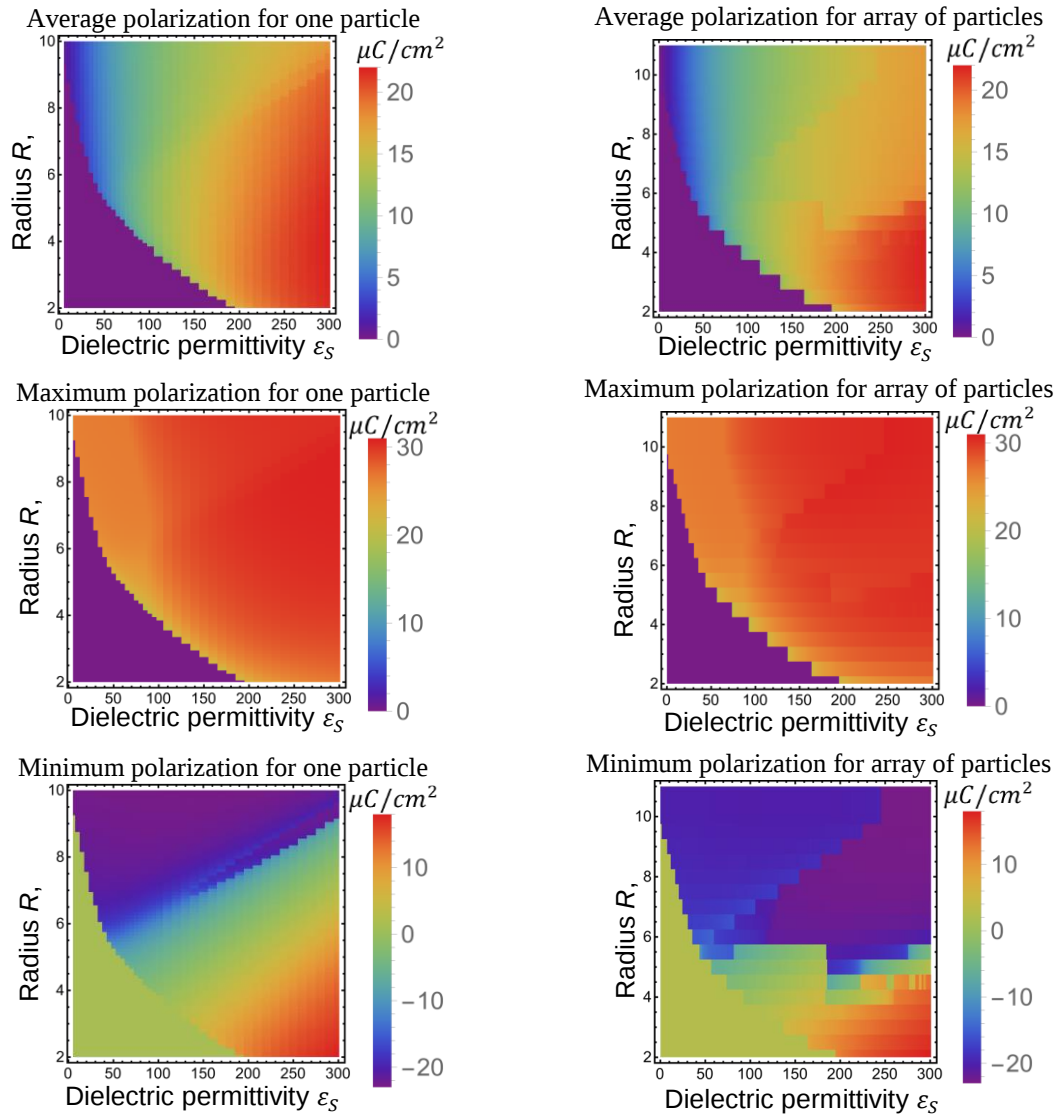


Fig. 2. Phase diagrams of the values of the average, maximum and minimum average polarization of an individual nanowire as a function of  $R$  and  $\varepsilon_s$ : (left) one nanowire in a polymer, (right) an array of nanowires in a polymer.

**Acknowledgments.** The work of D.O.S., O.S.P. and A.N.M. are funded by the National Research Foundation of Ukraine (project “Manyfold-degenerated metastable states of spontaneous polarization in nanoferroics: theory, experiment and perspectives for digital nanoelectronics”, grant application 2023.03/0132). The work of E.A.E. is funded by the National Research Foundation of Ukraine (project “Silicon-compatible ferroelectric nanocomposites for electronics and sensors”, grant N 2023.03/0127). The work of O.V.B. is funded by the NAS of Ukraine, grant No. 07/01-2025(6) “Nano-sized multiferroics with improved magnetocaloric properties.”

1. Morozovska A. N., Bereznykov O. V., Strikha M. V. et al. Domain morphology, electrocaloric properties, and negative capacitance states of ferroelectric nanowires array: role of size and interfacial effects. *Composite Interfaces*, 1–18. (2025) <https://doi.org/10.1080/09276440.2025.2605389>.

# КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НЕСТАЦІОНАРНОГО РЕЖИМУ РОБОТИ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОЇ ХОЛОДИЛЬНОЇ КАМЕРИ МЕДИЧНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ

Хриков В.К., Черкез Р.Г., Вихор Л.М.

<sup>1</sup>Інститут термоелектрики Національної Академії наук та Міністерства освіти України,  
вул. Науки 1, Чернівці, 58029, Україна,  
[khrykov.vladyslav@chnu.edu.ua](mailto:khrykov.vladyslav@chnu.edu.ua)

<sup>2</sup>Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського 2,  
Чернівці, 58012, Україна

Розвиток сучасних медичних технологій потребує створення надійних та енергоефективних систем охолодження для зберігання лікарських препаратів, біологічних матеріалів та вакцин. Одним із перспективних напрямів є використання термоелектричних холодильних систем, які відзначаються компактністю, екологічною безпечністю, відсутністю рухомих частин та високою надійністю. Для підвищення ефективності таких систем важливим є дослідження їхніх теплових процесів у нестационарних режимах роботи. [1]

У роботі розглянуто математичну модель термоелектричної холодильної камери медичного призначення, яка враховує теплові характеристики основних елементів конструкції, зокрема їх тепловий опір та теплоємність. Такий підхід дозволяє більш точно відтворити реальні умови функціонування холодильної системи та адекватно описати процеси охолодження внутрішнього об'єму камери. [2]

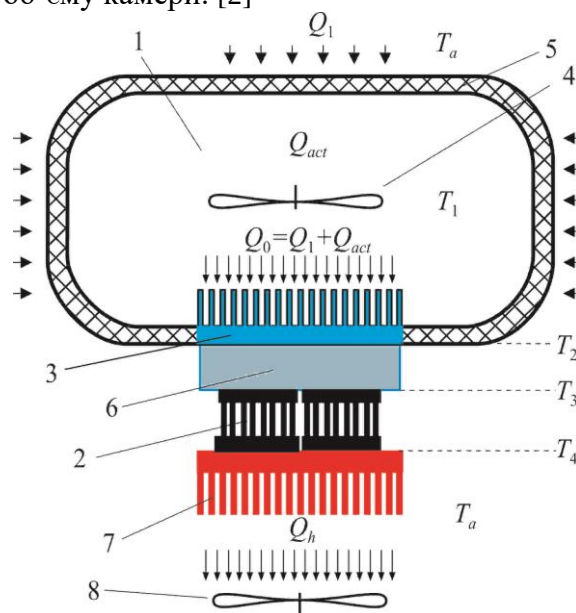


Рис. 1. Схема термоелектричної холодильної камери.

1 – холодильна камера; 2 – термоелектричні модулі; 3 – радіатор для передачі холоду в камеру;  
4 – вентилятор в камері; 5 – теплова ізоляція камери; 6 – металева вставка; 7 – радіатор для  
відведення тепла від тепловиділяючих спайів ТЕ модулів в навколишнє середовище; 8 –  
вентилятор.

Для аналізу динаміки температурного режиму використано метод математичного моделювання, що базується на розв'язанні системи рівнянь теплового балансу для окремих елементів конструкції холодильного пристрою. При цьому враховано теплові потоки між основними складовими системи, а також взаємодію камери з навколишнім середовищем. Такий підхід дозволяє дослідити зміну температури в часі та визначити особливості формування температурного поля в процесі роботи пристрою. [3]

Результати моделювання дають можливість оцінити вплив конструктивних параметрів та режимів роботи термоелектричних модулів на процес охолодження камери. Отримані залежності дозволяють визначити характер зміни температури в нестационарному режимі, а також встановити часові параметри досягнення заданого температурного рівня. Це створює передумови для оптимізації конструкції холодильної системи та підвищення її енергетичної ефективності.

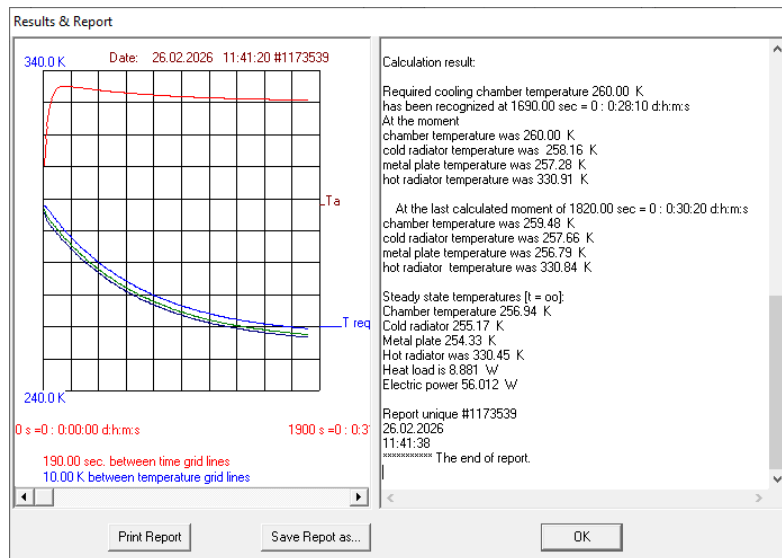


Рис. 2. Інтерфейс програми для виводу результатів розрахунку характеристик термоелектричної холодильної камери.

Проведене дослідження демонструє ефективність використання комп'ютерного моделювання для аналізу теплових процесів у термоелектричних холодильних пристроях медичного призначення. Розроблена модель може бути використана для подальших досліджень, спрямованих на вдосконалення конструкції холодильних камер, покращення їх експлуатаційних характеристик та забезпечення стабільних температурних умов зберігання медичних матеріалів.

**Ключові слова:** термоелектричне охолодження, холодильна камера, математичне моделювання, нестационарний режим, тепловий баланс, медичні холодильні системи.

1. Zaferani, S.H., Sams, M.W., Ghomashchi, R., Chen, Z.-G. (2021). Thermoelectric coolers as thermal management systems for medical applications: design, optimization, and advancement. *Nano Energy* 90, 106572. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2021.106572>
2. Kobylanskyi, R., Vikhor, L., Fedoriv, R., & Izvak, Y. (2024). Design of a multi-stage thermoelectric cooler for a human heart ablation device. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 5–13. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2024-4-5-13>
3. Anatychuk, L.I. Cherkez, R.G. (2012). Energy potential of permeable segmented thermoelements in cooling mode. *Journal of Electronic Materials* 41(6), 1115–1119.

## Фотохімічний синтез наночастинок срібла, вкритих полі(N-ізопропілакриламідом): морфологічна і спектральна характеристика та моделювання

Хутько М.М.<sup>1</sup>, Лопатинський А.М.<sup>1,2</sup>, Литвин В.К.<sup>1</sup>, Демидов П.В.<sup>1</sup>,  
Балаєва Н.О.<sup>3</sup>, Цан Д.Р.Т.<sup>3</sup> та Чегель В.І.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарівського НАН України, пр. Науки, 41, Київ 03028, Україна, [mariikhutko@gmail.com](mailto:mariikhutko@gmail.com)

<sup>2</sup> Навчально-науковий інститут високих технологій, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, вул. Володимирська, 64/13, Київ 01601, Україна

<sup>3</sup> Інститут фізики напівпровідників, Хемніцький технологічний університет, вул. Націонен, 62, Хемніц 09111, Німеччина

Наночастинки (НЧ) шляхетних металів широко використовуються в багатьох галузях, включно з наномедициною та біохемосенсорикою. Їхні корисні властивості визначаються розміром, морфологією та покриттям [1] завдяки явищу локалізованого поверхневого плазмонного резонансу (ЛППР). Для зменшення витрат та часу, а також для уникнення процесів агрегації під час синтезу та покриття наноструктур, замість багатостадійного процесу з модифікацією кінцевих груп полімеру можна використовувати метод полімеризації одночасно із синтезом малих (зародкових) наночастинок [2].

На основі класичного температурного синтезу [3] запропоновано модифікований метод утворення НЧ срібла шляхом їх одночасного формування в присутності  $\text{NaBH}_4$  та N-ізопропілакриламід (NIPAM), який полімеризується під дією УФ-опромінення з утворенням стабілізуючого шару pNIPAM на поверхні НЧ. Встановлено, що змінюючи порядок додавання реагентів та час УФ-опромінення реакційної суміші, можна керувати розмірами та дисперсністю отриманих НЧ та товщиною полімерного покриття на їхній поверхні. Досліджено спектральні та морфологічні властивості утворених плазмонних наноструктур, а також стабільність відповідних колоїдних розчинів.

Для аналізу еволюції росту НЧ срібла та формування полімерного покриття було проведено

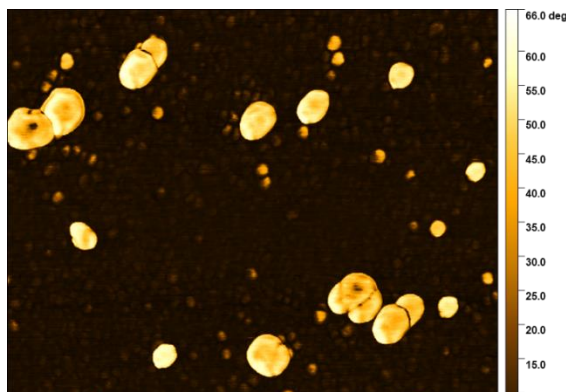


Рис. 1 АСМ-зображення зародкових НЧ срібла, вкритих полімером pNIPAM

комп'ютерне моделювання спектрів екстинкції світла ЛППР на основі теорії Мі. Розмірні параметри НЧ срібла та полімерного покриття були отримані залежно від часу УФ-опромінення та порівняні з експериментальними даними за допомогою методів атомно-силової мікроскопії (АСМ) (Рис. 1) та динамічного розсіювання світла.

Встановлено, що запропонований метод фотохімічного синтезу НЧ срібла з полімерним покриттям pNIPAM дозволяє отримувати стабільні колоїдні розчини з контрольованим розподілом за розміром. Відповідно, він є перспективним з точки зору подальших застосувань вказаних НЧ під час

приготування наноконтейнерів для доставки ліків, а також як підсилювачів оптичного сигналу для плазмон-підсиленої спектроскопії.

1. Shin, W.; Kang, K.; Jang, H. Recent Advances in Nanoparticle Shape and Composition Regulation Based on Galvanic Replacement for Cancer Treatment // Preprints.org.-2018.

2. Sergeyeva T., Yarynka D., Lytvyn V., Demydov P., Lopatynskiy A., Stepanenko Y., Brovko O., Pinchuk A., Chegel V. Highly-selective and sensitive plasmon-enhanced fluorescence sensor of aflatoxins // Analyst.-2022.-147.-P. 1135-1143.

3. Khutko M., Lopatynskiy A., Lytvyn V., Demydov P., Chegel V. Synthesis and optical characterization of seed silver nanoparticles in situ coated with poly-(N-isopropylacrylamide) // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics.-2025.-28, N 4.-P. 449-455.

# Розробка схеми функційної для системи вимірювання параметрів медичного терапевтичного обладнання

І.І. Ревуцький, В.С. Єременко, В.М. Мокійчук

Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського", Берестейський просп., 37, Київ, 03056, Україна

Представлена в даній роботі функційна схема (рис.1) відображає принцип дії апаратно-програмного комплексу, призначення якого полягає у вимірюванні сили високочастотного струму фізіотерапевтичного обладнання. Основною метою системи є забезпечення точного контролю параметрів лікувального впливу шляхом перетворення теплової дії струму на пропорційний електричний сигнал [1]. Архітектура розробленого вимірювального комплексу охоплює всі етапи проходження сигналу: від первинного зняття даних з еквівалента біологічного навантаження до їх цифрової обробки та візуалізації. Застосування мікроконтролерної плати дозволяє повністю автоматизувати математичні обчислення та оперативно виводити результати. Наведений нижче опис детально розкриває алгоритм взаємодії основних апаратних вузлів та програмних компонентів цієї системи в процесі роботи.

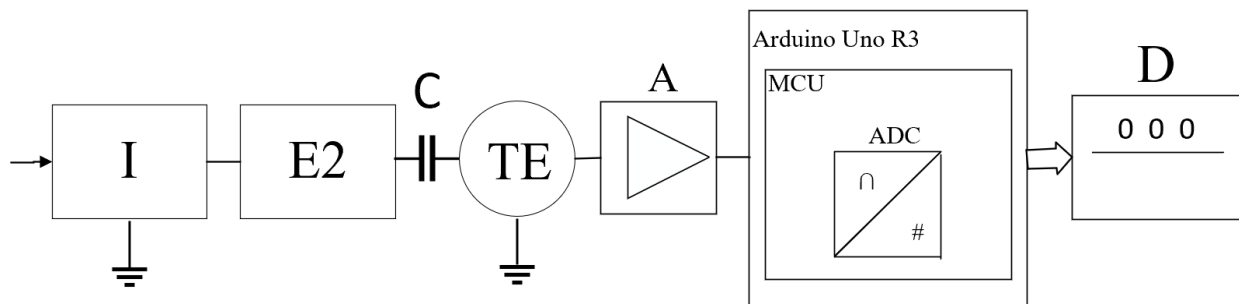


Рисунок 1 – схема функційна електрична приладу для вимірювання вихідного струму апарату для дарсонвалізації «Іскра-1»

Робочий цикл вимірювальної системи починається з генерації лікувального високочастотного струму апаратом «Іскра-1» [2], який на схемі виступає джерелом сигналу (блок I). Замикання електричного ланцюга відбувається через спеціальне навантаження (блок E2) — металеву ізольовану ємність із водою певного діаметра. Цей резервуар відіграє роль еквівалента навантаження, оскільки його фізичні характеристики дозволяють імітувати властивості біологічних тканин людини під час проведення фізіотерапевтичних процедур.

Для підключення вимірювального комплексу до основного контуру використовується розділовий конденсатор C. Він дозволяє високочастотним імпульсам безперешкодно проходити до головного чутливого елемента — термоперетворювача ТВБ-4 (блок TE). Принцип дії цього блока базується на тепловому ефекті електричного струму: проходячи через нагрівач, високочастотний сигнал підвищує його температуру, внаслідок чого у термопарі

генерується термо-електрорушійна сила (термо-ЕРС). Відповідно, напруга на виході цього блоку є прямо пропорційною до сили струму, що діє на нагрівальний елемент.

Оскільки вихідний сигнал з термоперетворювача є доволі слабким, він потребує попередньої підготовки перед цифровою обробкою. Для цього у схемі передбачено блок підсилювача (А), який підсилює напругу на виході до рівня, що відповідає динамічному діапазону цифрової частини пристрою. Підсилений аналоговий сигнал надходить до мікроконтролерної плати Arduino Uno R3 [3]. На функційній схемі вона представлена блоком мікроконтролера (MCU), до складу якого входить інтегрований аналого-цифровий перетворювач (ADC). АЦП здійснює дискретизацію вхідної напруги та її перетворення у відповідний цифровий код.

Отримані дані обробляються безпосередньо обчислювальним ядром мікроконтролера ATmega328P. Спеціалізоване програмне забезпечення, написане в середовищі Arduino IDE і завантажене у пам'ять мікроконтролера, виконує перерахунок отриманих цифрових кодів у реальні значення сили струму згідно з калібрувальною характеристикою термоперетворювача ТВБ-4. На завершальному етапі сформований результат передається на пристрій виведення (блок D), у якості якого виступає рідкокристалічний дисплей, що забезпечує відображення виміряного значення вихідного струму у зручному для користувача вигляді.

1. DSTU EN ISO 15189:2015. Medical laboratories. Requirements for quality and competence. [Effective from 2015-06-22]. Official edition. Kyiv : SE "UkrNDNC".-2015.-46 p.

2. M

3. Arduino, Arduino UNO R3 Datasheet,

<https://docs.arduino.cc/resources/datasheets/A000066-datasheet.pdf>

i

k

a

,

I

s

k

r

a

-

I

.

A

p

p

a

r

a

t

u

s

f

o

## Багатоканальний механізм теплотранспорту в вуглецевих матеріалах

Ю.В. Горбатенко, В.В. Саган, О.О. Романцова, О.І. Кривчіков, О.О. Королук

*Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б.І. Веркіна НАН України,  
пр-т Науки, 47, Харків 61103, Україна  
[horbatenko@ilt.kharkov.ua](mailto:horbatenko@ilt.kharkov.ua)*

Проведено експериментальні дослідження температурних залежностей теплопровідності,  $\kappa(T)$ , оксиду графену (GO) в інтервалі температур 4.5–300 К. Виявлено низькотемпературне плато ( $\kappa_{pl} \approx 4.5$  К), після якого теплопровідність зразків поступово зростає з підвищенням температури, що є схожим на склоподібний характер  $\kappa(T)$ . Також було досліджено теплопровідність зразків (GO), які піддавалися тиску 6, 8, 10 тон: там теж виявлено низькотемпературне плато ( $\kappa_{pl} \leq 4$ К). Для всіх досліджених зразків встановлено, що експериментальні дані  $\kappa(T)$  можуть бути представлені у вигляді апроксимації [1]:

$$\kappa(T) = \kappa_{pl} + \kappa_0 \exp(-E/T) \quad (1),$$

де  $\kappa_{pl}$  – це величина низькотемпературного плато теплопровідності,  $\kappa_0$  – передекспоненціальний множник,  $E$  – характеристична енергія домінуючий збуджень, які приймають участь у теплоtransportі. Таке представлення теплопровідності узгоджується з узагальненою теорією теплоtransportу [2], в якій автори запропонували концепцію, що тепло в твердому тілі може розповсюджуватися двома основними шляхами – квазічастинковим або т.зв. внесок Пайєрлса  $\kappa_p$ , який домінує при низьких температурах (у випадку склоподібної поведінки це плато) та внеску, який зумовлений хвильовими властивостями теплоносіїв,  $\kappa_C$  – це т.зв. «когерентний» внесок в теплопровідність, що реалізується шляхом тунелювання при вищих температурах, і набуває наступного вигляду:

$$\kappa(T) = \kappa_p + \kappa_C \quad (2).$$

Встановлено, що від 5 до 100 К експериментальні дані  $\kappa(T)$  можуть бути описані за допомогою виразу (1); вище 100 К дані  $\kappa(T)$  монотонно зростають, і в результаті аналізу було встановлено, що вони можуть бути описані за допомогою наступної апроксимаційної підгонки:

$$\begin{aligned} \kappa(T) = \kappa_{pl} + \kappa_{C1}(T) + \kappa_{C2}(T) + \kappa_{C3}(T) = \\ \kappa_{pl} + \kappa_{01} \exp(-E_1/T) + \kappa_{02} \exp(-E_2/T) + \kappa_{03} \exp(-E_3/T), \end{aligned} \quad (3)$$

де  $\kappa_{0i}$  – передекспоненціальний множник, а  $E_i$  – характеристична енергія внеску хвилеподібного тунелювання та втрати когерентності між різними власними коливальними станами  $\kappa_{Ci}(T)$ : індекс  $i$  змінюється від 1 до 3 та стосується теплопереносу, який легко представити у вигляді виразу Арреніуса для різних типів збуджень [3].

Зазначимо, що зразок GO, що був спресований під тиском 10 тон, показав найбільше збільшення теплопровідності на 37% при 100 К порівняно з неспресованим зразком GO. Це свідчить про те, що пресування зразків оксиду

графена значно покращує їх теплопровідність, особливо у інтервалі температур 40 – 90 К, що може вказувати на зміни у структурі матеріалу.

Результати дослідження теплопровідності GO порівняно з даними з літератури для графенової кераміки та частково відновленого оксиду графену (PRGO-400) показали, що теплопровідність GO зразків близька до PRGO-400, але трохи нижча за GOP [4]. Характер поведінки теплопровідності в цілому є подібним, що вказує на схожість у структурі та властивостях цих матеріалів.

Запропонована модель теплопровідності з кількома внесками дозволяє точніше описати поведінку матеріалів у широкому температурному діапазоні, що є важливим для подальших досліджень і розробок нових матеріалів з високими теплопровідними властивостями.

**Вдячність:** дана робота була виконана в рамках проєкту НФДУ № 2023.03/0012 та молодіжного НДР 12/04-2026 НАН України

1. Krivchikov A. I., Horbatenko Y. V., Korolyuk O. A., Romantsova O. O., Kryvchikov O. O., Szewczyk D., & Jezowski A. Exponential approximation of the coherence contribution to the thermal conductivity of complex clathrate-type crystals // *Materialia*. – 2023.- **32**. -P. 101944.
2. Simoncelli M., Marzari N., & Mauri F. Unified theory of thermal transport in crystals and glasses // *Nature Physics* -2019.-**15**, N 8.-P. 809-813.
3. Korolyuk O. A., Sagan V. V., Krivchikov A. I., Konstantinov V. A., & Horbatenko Y. V. Multi-channel heat transfer in molecular crystals and their solutions // *Low Temperature Physics* - 2025. – **51**, N 9. -P. 1048-1060.

## Машинне навчання для класифікації пошкоджень в ультразвуковій діагностиці

І.М. Дзюра<sup>1</sup>, Р.І. Романишин<sup>2</sup>

*Львівський національний університет імені Івана Франка, факультет електроніки та  
комп'ютерних технологій, вул. Драгоманова 50, 79000, Львів, Україна*  
*<sup>1</sup>ivan.dziurakh@lnu.edu.ua, <sup>2</sup>rostyslav.romanyshyn@lnu.edu.ua*

Ультразвукова діагностика є одним із найпоширеніших методів неруйнівного контролю, що застосовується в різних галузях. Дані, отримані в результаті діагностики, можуть бути представлені у вигляді А-сканів, В-сканів, С-сканів. Інтерпретація цих даних традиційно покладалася на експертну оцінку людини, яка є трудомісткою, суб'єктивною та погано масштабованою. У зв'язку з цим актуальним є застосування машинного та глибокого навчання для автоматизації бінарної класифікації (пошкоджено / не пошкоджено) та багатокласової підкласифікації дефектів (тріщини, розшарування).

У задачі обробки сирих одновимірних А-сканів запропоновано компактну CNN із двома згортковими, двома пулінг та двома повнозв'язними шарами, орієнтовану на аналіз сигналів кільцевих зварних з'єднань з аустенітної та мартенситної нержавіючої сталі [1]. Модель розв'язувала задачу бінарної класифікації, тобто розрізнення щільних дефектів та бездефектних зон, на базі 22 631 сигналу та досягла точності 98,2 % на тестовій вибірці з 1 000 зразків. Це суттєво перевищило результати класифікаторів на основі інженерних ознак (вейвлет-коефіцієнтів та спектральних характеристик Фур'є). Результати підтверджують, що навіть архітектурно прості мережі здатні ефективно виокремлювати діагностичні ознаки безпосередньо із сирих часових рядів, повністю усуваючи етап ручного проєктування ознак.

На рівні двовимірних В-сканів розроблено архітектуру UT-YOLO, а саме модифіковану мережу YOLO з оптимізованими згортковими блоками та механізмом просторової уваги, призначену для багатокласової детекції дефектів на зображеннях залізничних коліс швидкісних потягів [2]. Модель одночасно локалізувала та класифікувала чотири типи пошкоджень: поверхневі, підповерхневі та внутрішні тріщини, а також тріщини диска колеса. Порівняно з базовими детекторами, UT-YOLO покращила повноту на 37%, mAP@0,5 на 36% та mAP@0,5:0,95 на 43%, забезпечуючи обробку в реальному часі. Принципово важливим є промислове впровадження моделі у реальні сценарії інспектування залізничної інфраструктури, що робить цю роботу одним із небагатьох прикладів успішного переходу від лабораторного прототипу до промислової експлуатації.

Аналіз планарних С-сканів реалізовано через легковагову CNN з архітектурою автокодувальника (Autoencoded Classifier, AEC), застосовану до зображень, отриманих фазованою решіткою, на зразках CFRP-композитів [3]. Модель розрізняла три категорії: розшарування, ударні пошкодження та бездефектні зони, що фактично поєднує бінарний рівень детекції (наявність/відсутність дефекту) з подальшою підкласифікацією типу

пошкодження. Архітектура кодувальника-декодувальника забезпечила компактне представлення дефектних ознак із суттєво меншою кількістю параметрів порівняно зі стандартними глибокими мережами. АЕС перевершила базові моделі VGG та ResNet за точністю, водночас вимагаючи значно менших обчислювальних ресурсів та оперативної пам'яті, що є критичною перевагою для мобільних систем інспектування на виробництві.

Порівняльний аналіз виявив системні прогалини у сучасній літературі. Переважна більшість досліджень використовує лабораторні набори даних із штучними дефектами, тоді як валідація на реальних промислових даних із притаманними їм шумами та варіаціями морфології дефектів залишається рідкістю. Задача ієрархічної класифікації, тобто побудова єдиної системи, яка послідовно виконує бінарну детекцію та подальшу багатокласову підкласифікацію, практично не розроблена; існуючі моделі розв'язують ці задачі окремо. Також бракує порівнянь одних і тих самих архітектур на всіх трьох типах сканів одночасно. Крім того, аналіз крос-доменного узагальнення залишається вкрай обмеженим: моделі, навчені на одному матеріалі чи геометрії об'єкта контролю, рідко тестуються на інших, що ставить під сумнів їхню здатність до перенесення знань між різними промисловими сценаріями.

Проведений огляд засвідчує, що глибоке навчання вже забезпечує точність понад 95% у задачах класифікації дефектів за ультразвуковими даними всіх трьох типів зображень. Компактні CNN ефективно обробляють сирі А-скани, архітектури YOLO із механізмами уваги забезпечують багатокласову детекцію в реальному часі на В-сканах, а легковагові автокодувальники підходять для С-сканів в умовах обмежених обчислювальних ресурсів. Водночас перехід до промислового впровадження вимагає подолання розриву між лабораторними та реальними даними, створення каскадних ієрархічних класифікаторів та мультимодального злиття інформації з різних типів сканів.

1. Y. Shi, W. Xu, J. Zhang, and X. Li, Automated Classification of Ultrasonic Signal via a Convolutional Neural Network, *Applied Sciences*, vol. 12, no. 9, p. 4179, 2022. [Електронний ресурс]. - Режим доступу: <https://www.mdpi.com/2076-3417/12/9/4179>
2. Q. Zhang, J. Peng, K. Tian, A. Wang, J. Li, and X. Gao, Advancing Ultrasonic Defect Detection in High-Speed Wheels via UT-YOLO, *Sensors*, vol. 24, no. 5, p. 1555, 2024. [Електронний ресурс]. - Режим доступу: <https://www.mdpi.com/1424-8220/24/5/1555>
3. M. Ma, Z. Wang, Z. Gao, and M. Jiang, Ultrasonic Phased Array Testing and Identification of Multiple-Type Internal Defects in Carbon Fiber Reinforced Plastics Based on Convolutional Neural Network, *Materials*, vol. 18, no. 2, p. 318, 2025. [Електронний ресурс]. - Режим доступу: <https://www.mdpi.com/1996-1944/18/2/318>

# Пориста структура та стан поверхні термохімічно активованих вуглецевих матеріалів

Н.Я. Іванічок<sup>1,2</sup>, Б.І. Рачій<sup>2</sup>, Т.О. Лисів<sup>2</sup>, Т.Р. Бедрій<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, бульвар Академіка Вернадського, 36, Київ, 03142, Україна  
[natalia.ivanichok@gmail.com](mailto:natalia.ivanichok@gmail.com)

<sup>2</sup> Карпатський національний університет ім. Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна

Пористі вуглецеві матеріали є перспективними електродними матеріалами для електрохімічних конденсаторів завдяки високій питомій поверхні, розвиненій пористій структурі та стабільності в агресивних середовищах. Ефективність їх використання значною мірою визначається особливостями структури, морфологією поверхні та ступенем структурної впорядкованості вуглецевого каркасу. Одним із найбільш ефективних методів формування розвиненої пористості є термохімічна активація, що дозволяє керувати структурою матеріалу шляхом зміни умов синтезу та співвідношення реагентів.

Метою даної роботи є дослідження пористої структури та стану поверхні термохімічно активованих вуглецевих матеріалів (АВМ), отриманих при різних співвідношеннях маси лужного активатора і маси вихідного карбонізованого матеріалу. Шкаралупу волоських горіхів попередньо карбонізували при 350 °С (10 °С/хв, 30 хв), після чого карбонізат подрібнювали (~500 мкм) і змішували з гідроксидом калію та водою у співвідношенні  $m(\text{KOH}):m(\text{H}_2\text{O}):m(\text{C}) = y:1:1$  ( $y = 0,25-2,0$ ). Після висушування суміш піддавали активації при 900 °С (10 °С/хв, 30 хв) з подальшим охолодженням у вимкненій печі. Отримані матеріали відмивали дистильованою водою до нейтрального рН. Зразки позначали відповідно до кількості активатора (наприклад, N150:  $m(\text{KOH}):m(\text{H}_2\text{O}):m(\text{C}) = 1,50:1:1$ ).

Формування пористої структури АВМ досліджували методом низькотемпературної адсорбції азоту. Аналіз ізотерм адсорбції-десорбції, отриманих у діапазоні відносних тисків  $P/P_0 = 0-1$ , показав, що всі зразки характеризуються ізотермами, типовими для мікропористих вуглецевих матеріалів з певним внеском мезопор [1]. На початкових стадіях активації (зразок N025) спостерігається відносно невисокий об'єм адсорбованого газу, що свідчить про обмежений розвиток пористої структури. Із підвищенням кількості активатора відбувається інтенсивне формування пористості, що проявляється у збільшенні питомої площі поверхні ( $S_{\text{BET}}$ ) та об'єму пор ( $V_{\Sigma}$ ). Фрактальну розмірність поверхні вуглецевих зразків визначали методом Френкеля-Хелсі-Хілла в області мікр- ( $D_{f1}$ ) та мезопор ( $D_{f2}$ ) [2]. Параметри пористої структури та фрактальної розмірності наведено в таблиці 1.

Таблиця 1. Параметри пористої структури АВМ

| АВМ  | Площа поверхні (м <sup>2</sup> /г) |                    | Об'єм пор (см <sup>3</sup> /г) |                    | $S_{\text{micro}}/S_{\text{BET}}$<br>(%) | $D_{f1} = 3A+3$ | $D_{f2} = A+3$ |
|------|------------------------------------|--------------------|--------------------------------|--------------------|------------------------------------------|-----------------|----------------|
|      | $S_{\text{BET}}$                   | $S_{\text{micro}}$ | $V_{\Sigma}$                   | $V_{\text{micro}}$ |                                          |                 |                |
| N025 | 246                                | —                  | 0,436                          | —                  | —                                        | 1,69            | 2,32           |
| N050 | 545                                | 148                | 0,518                          | 0,057              | 27                                       | 2,35            | 2,65           |
| N075 | 916                                | 358                | 0,803                          | 0,138              | 39                                       | 2,60            | 2,69           |
| N100 | 1113                               | 645                | 0,842                          | 0,261              | 58                                       | 2,60            | 2,77           |
| N125 | 993                                | 565                | 0,812                          | 0,229              | 57                                       | 2,61            | 2,77           |
| N150 | 856                                | —                  | 1,041                          | —                  | —                                        | 2,25            | 2,58           |
| N175 | 1132                               | 490                | 0,997                          | 0,483              | 43                                       | 2,38            | 2,72           |
| N200 | 1065                               | 668                | 0,771                          | 0,271              | 63                                       | 2,66            | 2,79           |

Отримані значення фрактальної розмірності поверхні АВМ показали, що поверхня досліджуваних матеріалів характеризується значною геометричною складністю. Встановлено, що зі збільшенням ступеня активації фрактальна розмірність поверхні зростає, що свідчить про ускладнення морфології та збільшення нерегулярності пористого простору.

Морфологічні особливості поверхні АВМ досліджували методом скануючої електронної мікроскопії. Зображення показали, що початкові зразки характеризуються порівняно компактною поверхнею з окремими порами та тріщинами (рис.1). Зі зростанням ступеня активації структура поверхні стає більш рихлою та неоднорідною. Для зразків N075-N125 характерне формування розвиненої системи пор і каналів, що утворюють складну тривимірну мережу. Поверхня цих матеріалів має виражену шорсткість і значну кількість дефектних ділянок, що пов'язано з інтенсивним вилученням атомів вуглецю під час активації. У зразках із найвищим ступенем активації (N175-N200) морфологія поверхні стає більш фрагментованою. Спостерігається формування агломератів частинок із контактами точкового типу та збільшення кількості дефектів. Така структура свідчить про перебудову вуглецевого каркасу, що супроводжується збільшенням кількості пор, але одночасно може призводити до зменшення механічної цілісності матеріалу.

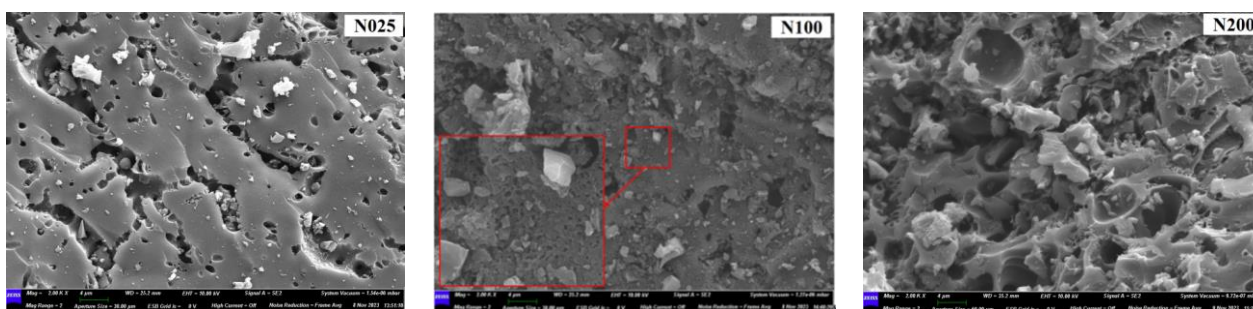


Рисунок 1. Зображення скануючої електронної мікроскопії (масштаб 4 мкм) для зразків АВМ (на вставці масштаб 1 мкм)

Отримані результати свідчать, що термохімічна активація дозволяє ефективно керувати пористою структурою та морфологією поверхні вуглецевих матеріалів. При помірних ступенях активації формується ієрархічна система мікро- та мезопор, яка забезпечує значне збільшення питомої поверхні. Водночас надмірна активація призводить до структурної деструкції каркасу та зміни морфології поверхні.

*Це дослідження було (частково) профінансовано програмою НАТО «Наука заради миру та безпеки» за грантом № (G6166).*

1. Thommes M., Kaneko K., Neimark A. V., Olivier J. P., Rodriguez-Reinos, F., Rouquerol J., Sing K. S. W. Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report) // Pure and Applied Chemistry. - 2015. - **87**(9-10). - P. 1051-1069.
2. Neimark A.V. A New Approach to the Determination of the Surface Fractal Dimension of Porous Solids // Physica A.-1992.-**191**.-P. 158-167.

## Порівняльний аналіз впливу розрядності АЦП на енергетичну роздільну здатність сцинтиляційних детекторів

А.Р. Подвіянюк<sup>1</sup>, В.В. Кобичев<sup>1</sup>, Р.Ю. Чаплинський<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Інститут ядерних досліджень НАН України, пр. Науки, 47, Київ 03028, Україна

[anton.podv@ukr.net](mailto:anton.podv@ukr.net)

У роботі було досліджено вплив розрядності аналого-цифрового перетворювача (АЦП) на енергетичну роздільну здатність отриманих сцинтиляційних гамма-спектрів. Для набору сигналів було використано спектрометричний тракт, який складається зі сцинтиляційного кристала CsI(Tl), кремнієвого фотопомножувача (SiPM) та цифрового осцилографа OWON VDS6102A у двох режимах роботи АЦП (8 та 14 біт). Керування та збір даних здійснювалися за допомогою розробленого програмного забезпечення мовою програмування Python із використанням протоколу SCPI (Рис.1). Швидкість набору даних 125 мегавибірок за секунду для обох режимів.

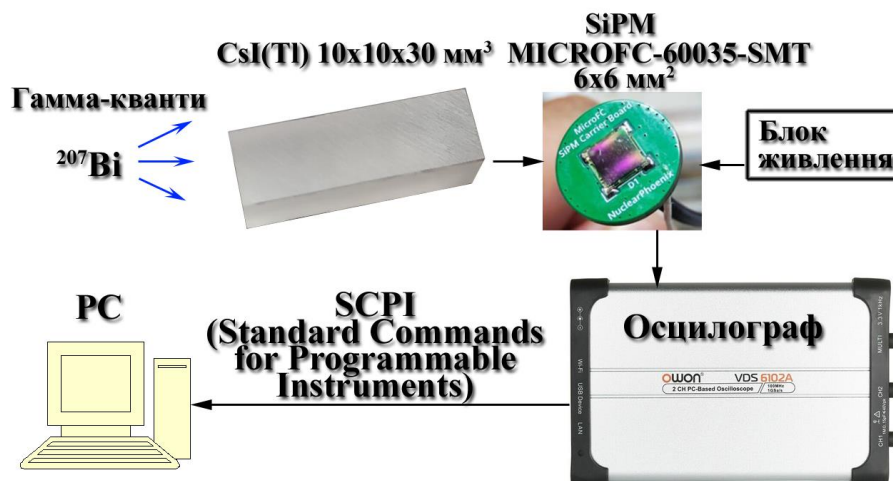


Рис 1. Блок-схема експериментальної установки для реєстрації гамма-спектрів  $^{207}\text{Bi}$ , на базі SiPM та осцилографа OWON6102A з підтримкою протоколу SCPI.

Гамма-спектри джерела  $^{207}\text{Bi}$  були отримані за допомогою методу інтегрування сигналу з відніманням базової лінії. Для визначення оптимального значення енергетичної роздільної здатності  $R$  (ПШПВ, %) було побудовано залежність  $R$  від довжини вікна інтегрування сигналів (Рис. 2, 3) для піків повного поглинання з енергіями 570 та 1063 кеВ, відповідно. Отримані спектри для мінімальних значень  $R$  показано на рис. 4, 5.

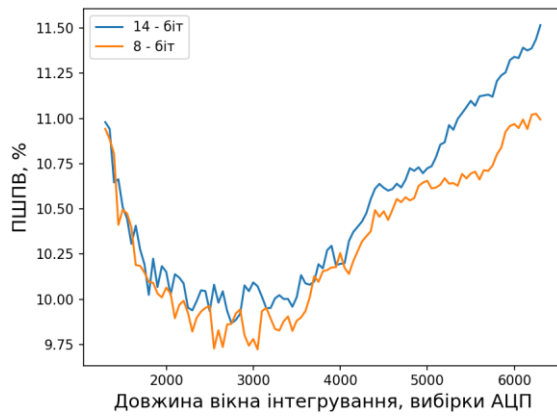


Рис. 2. Залежність  $R$  від довжини вікна інтегрування для піка з енергією 570 кеВ.

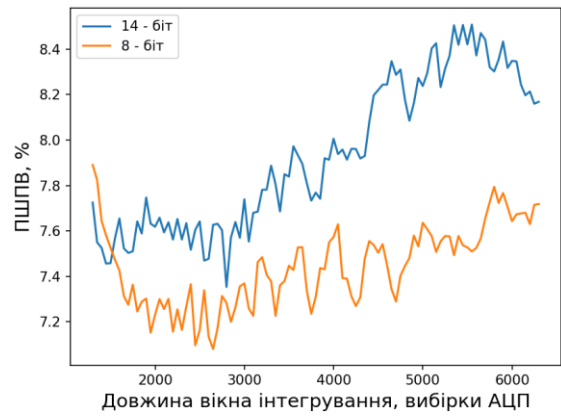


Рис. 3. Залежність  $R$  від довжини вікна інтегрування для піка з енергією 1063 кеВ.

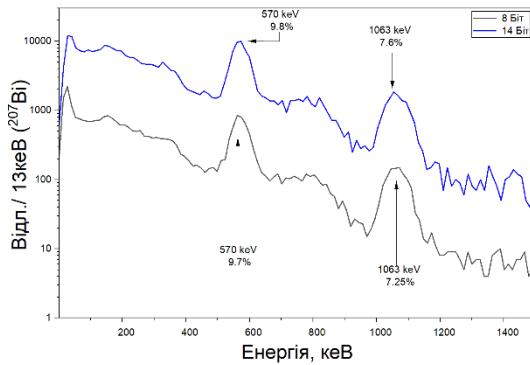


Рис. 4. Спектр з мінімальним значенням ПШПВ для піка 570 кеВ.

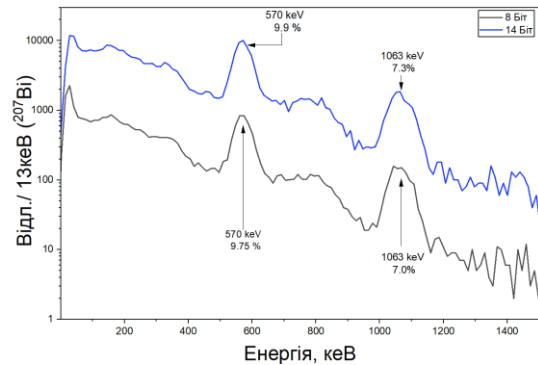


Рис. 5. Спектр з мінімальним значенням ПШПВ для піка 1063 кеВ.

Встановлено, що при даних експериментальних умовах перехід від 8-бітного до 14-бітного режиму роботи АЦП не призводить до суттєвої зміни енергетичної роздільної здатності спектрів. Цей результат має безпосереднє практичне значення: економічні 8-бітні цифрові перетворювачі є достатніми для даної конфігурації детектора, що значно спрощує вимоги до портативних гамма-спектрометрів, зокрема з застосуванням БПЛА[2, 3].

1. Knoll G. F. "Radiation Detection and Measurement". 4th Ed.; John Wiley & Sons, 2010.
2. MacFarlane J. et al., "Lightweight aerial vehicles for monitoring, assessment and mapping of radiation anomalies," Journal of Environmental Radioactivity. 2014. Vol. 136. P. 127-130. DOI: 10.1016/j.jenvrad.2014.05.008 .
3. Chaplynskyi R. Yu. et al., "Gamma spectrometry with CsI(Tl), NaI(Tl) and CdWO<sub>4</sub> scintillation crystals using a silicon photomultiplier", Nucl. Phys. At. Energy, 2026. Accepted to publication.

<sup>1</sup> E. Pop, Energy Dissipation and Transport in Nanoscale Devices. Nano Research 3, 147 (2010). DOI:10.1007/s12274-010-1019-z.

<sup>2</sup> J. Spencer Lundh, B. Chatterjee, Y. Song, A. G. Baca, R.J. Kaplar, T. E. Beechem, A. A. Allerman, A. M. Armstrong, B. A. Klein, A. Bansal, D. Talreja, A. Pogrebnyakov, E. Heller, V. Gopalan, J. M. Redwing, B. M.

Foley, and S. Choi, Multidimensional thermal analysis of an ultrawide bandgap AlGaN channel high electron mobility transistor. Appl. Phys. Lett. 115, 153503 (2019); DOI: 10.1063/1.5115013.

---

<sup>3</sup> C. D. S. Brites, P. P. Lima, N. J. O. Silva, A. Millman, V. S. Amaral, F. Palacio, and L. D. Carlos. Thermometry at the nanoscale. *Nanoscale*, 4, 4799 (2012). DOI: 10.1039/c2nr30663h.

<sup>4</sup> Halbertal, H. et al. Nanoscale thermal imaging of dissipation in quantum systems. *Nature* 539, 407 (2016).

<sup>5</sup> Yeliseiev, M., Kochelap, V.A. Theory of quasi-ballistic FET: steady-state regime and low-frequency noise *Semiconductor Science and Technology*, 2024, 39(12), 125008. DOI 10.1088/1361-6641/ad8bed.