



Х УКРАЇНСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ З ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ УНКФН-10

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ



Національна академія наук України
Міністерство освіти та науки України
Наукова рада з проблеми «Фізика напівпровідників і діелектриків» при Відділенні фізики і астрономії
Національної академії наук України
Українське фізичне товариство
Академія наук вищої школи України
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
Ужгородський національний університет
Інститут електронної фізики НАН України

*Конференція присвячена 100-річчю
з дня народження проф. П.І. Баранського і
75-річчю з дня заснування фізико-математичного факультету УжНУ.*

**X УКРАЇНСЬКА НАУКОВА
КОНФЕРЕНЦІЯ З ФІЗИКИ
НАПІВПРОВІДНИКІВ
УНКФН-10**

**X UKRAINIAN SCIENTIFIC
CONFERENCE ON PHYSICS
OF SEMICONDUCTORS
(USCPS-10)**

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

ABSTRACTS

**Ужгород, Україна
26 - 30 травня 2025**

**Uzhhorod, Ukraine
May 26-30, 2025**

УДК 537.311.322
Д 37

10-та Українська наукова конференція з фізики напівпровідників. Матеріали конференції. – Ужгород : ТОВ "РІК-У", 2025. – 452 с.

Дана збірка містить тези доповідей 10-ї Української наукової конференції з фізики напівпровідників (УНКФН-10) за участі зарубіжних науковців. Матеріали відображають зміст доповідей конференції, у яких викладені нові результати, стан і перспективи досліджень в області фізики напівпровідників за основними напрямками: нові фізичні явища в об'ємі та на поверхні напівпровідників, фізичні явища у низькорозмірних структурах, фізика напівпровідникових приладів, проблемні питання мікро- та наноелектроніки, сучасні фізико-технічні аспекти напівпровідникової сенсорики та оптоелектроніки, надвисокочастотна та терагерцова електроніка, матеріалознавство, технології та діагностика напівпровідниковых матеріалів.

У збірці надруковані тези пленарних, запрощених, усних та стендових секційних доповідей. Більша частина відповідних повних доповідей за рекомендацією програмного комітету і редакційної колегії конференції буде опублікована в тематичних випусках наукових журналів: "Український фізичний журнал", "Журнал фізичних досліджень", "Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics", "Функціональні матеріали", "Технология и конструирование в электронной аппаратуре", "Фотоелектроніка", "Сенсорна електроніка і мікросистемні технології".

УДК 537.311.322

Видання тез доповідей здійснено з авторських оригіналів, підготовлених до друку
Програмним комітетом і редакційною колегією конференції.

Рекомендовано до друку Вченого радою Інституту фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України (протокол № 9 від 14 травня 2025 р.).

Редакційна колегія:

Головний редактор	О.С. Беляєв
Члени редколегії:	Б.О. Кочелап
	О.В. Сtronський
	С.М. Левицький
	Р.А. Редько
	В.І. Смоланка
	В.М. Міца

ISBN 978-617-8390-92-1

© ТОВ "РІК-У"
© Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
Ужгородський національний університет, 2025

The present conference proceeding contains the abstracts of 10-th Ukrainian scientific conference on physics of semiconductors (USCSP-10) with participation of scientists from abroad.

The materials reflect the content of the conference papers, in which the novel results, state and perspectives of research in the field of semiconductor physics on principal directions are stated: new physical phenomena in the bulk and on the surface of semiconductors, the physical phenomena in low-dimensional structures, the physics of semiconductor devices, issues of micro- and nanoelectronics, advanced physical and technical aspects of semiconductor sensing and optoelectronics, microwave and terahertz electronics, materials science, semiconductor technology and diagnostics materials. The most part of appropriate full reports under the recommendation of program committee and editorial board will be published in the subject issues of the scientific journals: "Ukrainian Journal of Physics", "Journal of Physical Research", "Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics", "Functional Materials", "Technology and design in electronic equipment", "Photoelectronics", "Sensor Electronics And Microsystem Technologies".

Abstract edition is carried out from author's original copies prepared for printing by Program committee and an editorial board of conference.

Співголови конференції

Бєляєв О.Є., академік НАН України, радник при дирекції ІФН ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, голова наукової Ради з проблеми "Фізика напівпровідників і діелектриків" при Відділенні фізики і астрономії НАН України (Київ)
Смоланка В.І., д.м.н, проф., ректор Ужгородського національного університету (Ужгород)

Заступники голови

Височанський Ю.М., академік НАН України, проф., завідувач кафедри фізики напівпровідників Ужгородського національного університету (Ужгород)

Мельник В.П., д.ф.-м.н., проф., в.о. директора ІФН ім. В.Є.Лашкарьова НАН України (Київ)

Учений секретар – Ред'ко Р.А., к.ф.-м.н. (Київ)

Програмний комітет

Голова – Кочелап В.О., чл.-к. НАН України (Київ)

Заступник - Сtronський О.В., д.ф.-м.н., (Київ)

Блецкан Д.І., проф. (Ужгород), Валах М.Я., чл.-к. НАНУ (Київ), Вереш М. проф. (Угорщина), Вовк Р.В. акад. НАНУ (Харків), Гомонай Г.М., чл.-к. НАНУ (Ужгород), Гусинін В.П., чл.-к. НАНУ (Київ), Джаган В.М., чл.-к. НАНУ (Київ), Ільченко В.В. проф. (Київ), Каравчевцев В.О., проф. (Харків), Коваленко О.В. проф. (Дніпро), Корбутяк Д.В., проф. (Київ), Кордюк О.А. акад. НАНУ (Київ), Коротеєв В.В., д.ф.-м.н. (Київ), Левицький С.М., к.т.н. (Київ), Лепіх Я.І., проф. (Одеса), Лисенко В.С., чл.-к. НАНУ (Київ), Лихоліт М.І., чл.-к. НАНУ (Київ), Ловас Г.Й., к.ф.-м.н. (Ужгород), Локтев В.М. акад. НАНУ (Київ), Мамікін С.В. к.ф.-м.н. (Київ), Мележик П.М. акад. НАНУ (Харків), Міца В.М., проф. (Ужгород), Мриглод І.М., акад. НАНУ (Львів), Назаров О.М. проф. (Київ), Наумовець А.Г., акад. НАНУ (Київ), Порошин В.М., д.ф.-м.н. (Київ), Різак В. М., проф. (Ужгород), Рябченко С.М., чл.-к. НАНУ (Київ), Сизов Ф.Ф., чл.-к. НАНУ (Київ), Скришевський В.А. проф. (Київ), Сливка О.Г., проф. (Ужгород), Сминтина В.А., проф. (Одеса), Снопок Б.А., проф. (Київ), Стріха М.В., проф. (Київ), Товстолиткін О.І. проф. (Київ), Томашик В.М., проф. (Київ), Фегер О., проф. (Словаччина), Фодчук І.М. проф. (Чернівці), Цибрій З.Ф., д.ф.-м.н. (Київ), Цитровський О., проф. (Угорщина), Циуляну Д., чл.-к. АНМ (Молдова), Шевченко С.І., проф. (Харків), Шпотюк О.Й., проф. (Львів)

Локальний оргкомітет «УНКФН-10»

Голова – Міца Володимир Михайлович (Ужгород)

Когутич Антон Антонович (Ужгород)

Поп Михайло Михайлович (Ужгород)

Голомб Роман Михайлович (Ужгород)

Кондрат Олександр Борисович (Ужгород)

Гомонай Олександр Васильович (Ужгород)

Біланич Віталій Степанович (Ужгород)

Гуранич Павло Павлович (Ужгород)

Гомонай Олександр Олександрович (Ужгород)

Рубіш Василь Михайлович (Ужгород)

Левицький Сергій Миколайович (Київ)

Ред'ко Роман Анатолійович (Київ)

Горобей Оксана Ярославівна (Київ)

ПЛЕНАРНІ ДОПОВІДІ

INVITED REPORTS

Флексо-фонони та флексо-феррони у Ван-дер-Ваальсівських сегнетоелектриках: аналітична теорія і низькотемпературні піроелектричні ефекти

Березников О.В.¹, Морозовська Г. М.¹, Ю.М. Височанський²

¹ Інститут фізики НАН України, пр. Науки 46, 03028 Київ, Україна

² Інститут фізики і хімії твердого тіла Ужгородського національного університету, 88000 Ужгород, Україна

Було проведено аналітичне дослідження нових типів квазічастинок у низьковимірних сегнетоелектриках – флексо-фононів і флексо-ферронів, які виникають внаслідок дії флексоелектричного ефекту. Дослідження проведено на прикладі CuInP₂S₆ – одновісного Ван-дер-Ваальсівського сегнетоелектрика, що має складну багато-ямну структуру ландшафту вільної енергії та істотний внесок електрострикції другого та вищого порядку.

Для моделювання використано феноменологічний підхід Ландау-Гінзбурга-Девоншира з урахуванням динамічного флексоелектричного ефекту, релаксаційних процесів (механізм Халатнікова), нелінійної електрострикції та градієнтних поправок вищого порядку. Виведено дисперсійні співвідношення для оптичних ($\omega_O(\mathbf{k})$) і акустичних ($\omega_A(\mathbf{k})$) флексо-фононів, а також спектральні характеристики флексо-ферронів – бозонних збуджень, які описують флюктуації спонтанної поляризації та несуть електричний дипольний момент. Особливу увагу приділено впливу флексоелектричної сталої (f_{55}) на поведінку акустичних мод: встановлено, що при досягненні критичного значення цієї константи частота акустичного фонона обертається в нуль і далі стає уявною – це є ознакою динамічної нестабільності та можливого переходу до просторово модуляційної фази (див. рис. 1).

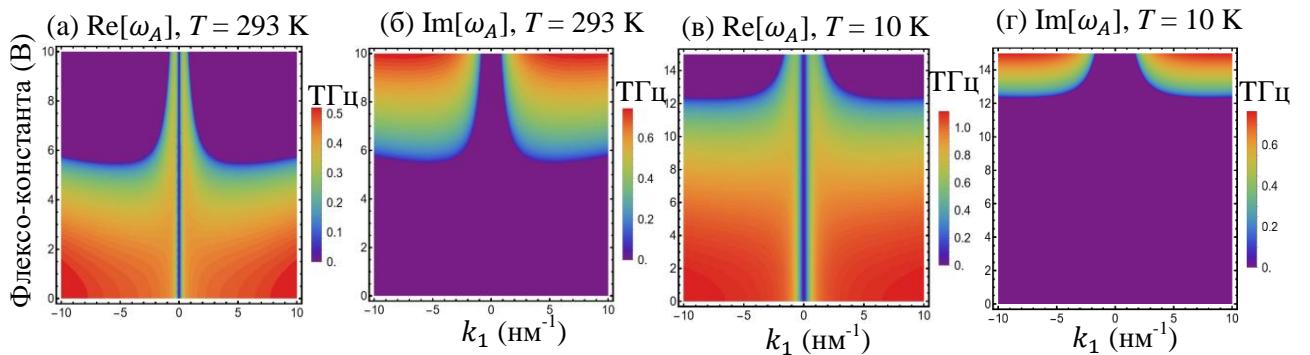


Рис. 1. Кольорові карти дійсної (а, в) та уявної (б, г) частин частоти акустичної фононної моди, ω_A , як функції хвильового числа k_1 та флексо-коєфіцієнта f_{55} , розраховані для $k_2 = k_3 = 0$, температурах $T = 293\text{ K}$ (а, б) та 10 K (в, г). Затухання відсутнє для всіх графіків.

Вперше показано, що внесок акустичних флексо-ферронів до піроелектричного та електрокалоричного ефекту домінує при низьких температурах, причому він на кілька порядків перевищує внесок оптичних флексо-ферронів [1]. Знайдено також критичні значення зовнішнього електричного поля, при яких частота акустичного флексо-ферона обнуляється (див. рис. 2(a, b)). Це явище встановлює межу допустимого поля для стабільної роботи сегнетоелектричних пристрій. Аналітичні апроксимації, отримані для піроелектричного заряду та його температурної похідної (рис. 3), узгоджуються з чисельними розрахунками та можуть бути використані для оптимізації характеристик відповідних матеріалів.

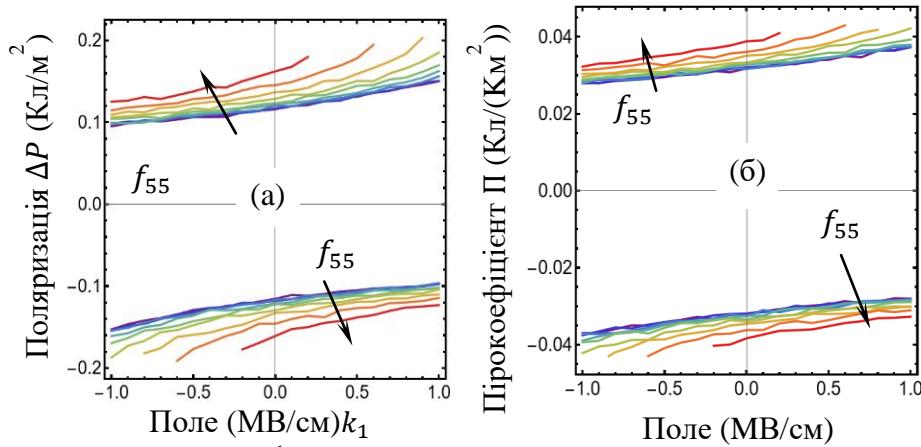


Рис. 2. Залежності зміни поляризації ΔP (а) та піроелектричного коефіцієнта Π (б) від електричного поля (с, д), розраховані для різних значень флексоелектричного коефіцієнта f_{55} , що змінюються від 0 до 8 В з кроком 1 В (див. різні криві).

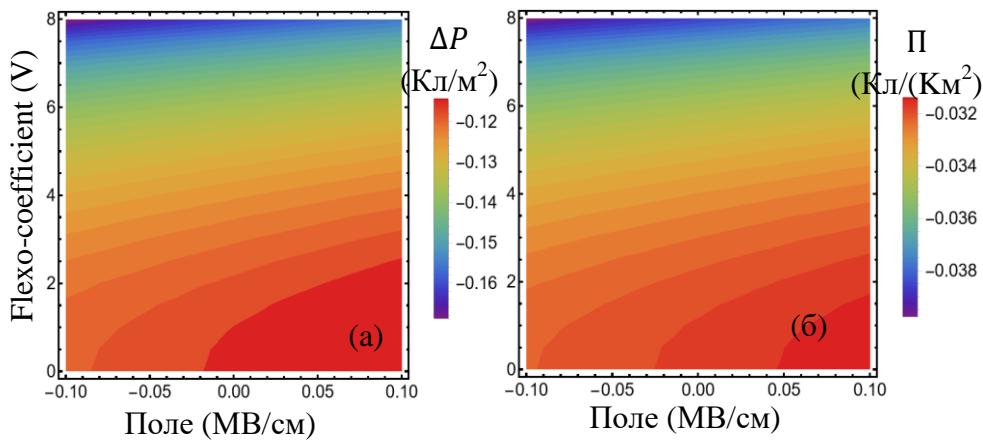


Рис 3. Електрична поляризація ΔP (а) та піроелектричний коефіцієнт Π (б) як функції флексо-коефіцієнта f_{55} та електричного поля E_3 , розраховані при 10 К без врахування затухання.

Отримані результати є важливими як для фундаментального розуміння колективних збуджень у низьковимірних ферроелектриках, так і для прикладних цілей — зокрема, у сенсорних технологіях, наноелектроніці, термоелектриці та пристроях керованого теплопереносу.

Робота О.В.Б. та Г.М.М. підтримана цільовою програмою Національної академії наук України, проект № 5.8/25-П «Енергозберігаючі та екологічно чисті нанорозмірні фероїки для розвитку сенсорики, наноелектроніки та спінtronіки».

Література

- [1]. A. N. Morozovska, E. A. Eliseev, O. V. Bereznikov, M. Ye. Yelisieiev, G.-D. Zhao, Y. Zhu, V. Gopalan, L.-Q. Chen, J.-M. Hu, and Y. M. Vysochanskii, “Flexo-phonons” and “Flexo-ferrons” in Van der Waals ferroelectrics, (2025),
<https://doi.org/10.48550/arXiv.2503.06305>

Ідентифікація ДНК послідовностей та однонуклеотидного поліморфізму методом Раман-спектроскопії

Р. Голомб^{1,2}, А. Чакі², Б. Зентай², Л. Хіміч², М. Вереш².

¹ Ужгородський національний університет, вул. Заньковецької 89а, Ужгород, 88015, Україна

² Інститут фізики та оптики твердого тіла, HUN-REN Вігнерівський науково-дослідний центр фізики, вул. Конкой-Теге Міклош 29-33, Будапешт, 1121, Угорщина

Рибонуклеїнова (РНК) і дезоксирибонуклеїнова (ДНК) кислоти є молекулярною основою життя, виконуючи ключові функції зберігання, передачі й реалізації генетичної інформації. Ідентифікація нуклеотидних послідовностей має важливе значення для виявлення РНК-вірусів та небезпечних мутацій ДНК. До того ж, однонуклеотидні варіанти (Single nucleotide variant, SNV), які включають однонуклеотидні поліморфізми (Single nucleotide polymorphism, SNP) у ДНК послідовності, є маркерами різних захворювань людини, зокрема деяких видів раку. Тому існує постійна потреба в точній та чутливій діагностиці таких точкових варіантів.

Раман-спектроскопія, яка базується на непружному розсіюванні фотонів, дозволяє отримувати інформацію про структуру та міжмолекулярні взаємодії, що робить її корисною для ідентифікації окремих молекул. Проте застосування цього методу в біотехнології, як альтернативи традиційній електронній спектроскопії, значно обмежене двома факторами: (i) більшість функціональних груп біомолекул мають низькі поперечні перерізи розсіювання; (ii) їх характеристичні коливальні смуги мають тенденцію до спектрального перекриття. Сучасні методи, такі як Раман-спектроскопія з поверхневим підсиленням (Surface-enhanced Raman spectroscopy, SERS), когерентна антістоксова Раман-спектроскопія (Coherent anti-Stokes Raman spectroscopy, CARS) та вимушена Раман-спектроскопія (Stimulated Raman spectroscopy, SRS) дають змогу частково вирішити проблему чутливості.

Новим підходом до вирішення обмеження специфічності може стати використання Раман-міток – функціональних груп, прикріплених до біологічних зондів. Зокрема, Раман-спектроскопія міченіх алкінами біомолекул є перспективною альтернативою флуоресцентній мікроскопії для біомолекулярної візуалізації. Алкіни, які містять потрійний зв'язок між атомами вуглецю, мають високу Раман активність і

характеризуються коливальними смугами в області ~ 1800 - 2800 cm^{-1} , що дозволяє уникати перекриття (Рис. 1 а,б). Крім того, порівняно з флуоресцентними мітками, невеликий розмір алкінів є перевагою при дослідженні природних біологічних або біохімічних процесів. Це робить їх перспективними біоортогональними мітками для Раман візуалізації (Raman imaging) в біології та медицині, включаючи ідентифікацію біомолекул у живих клітинах.

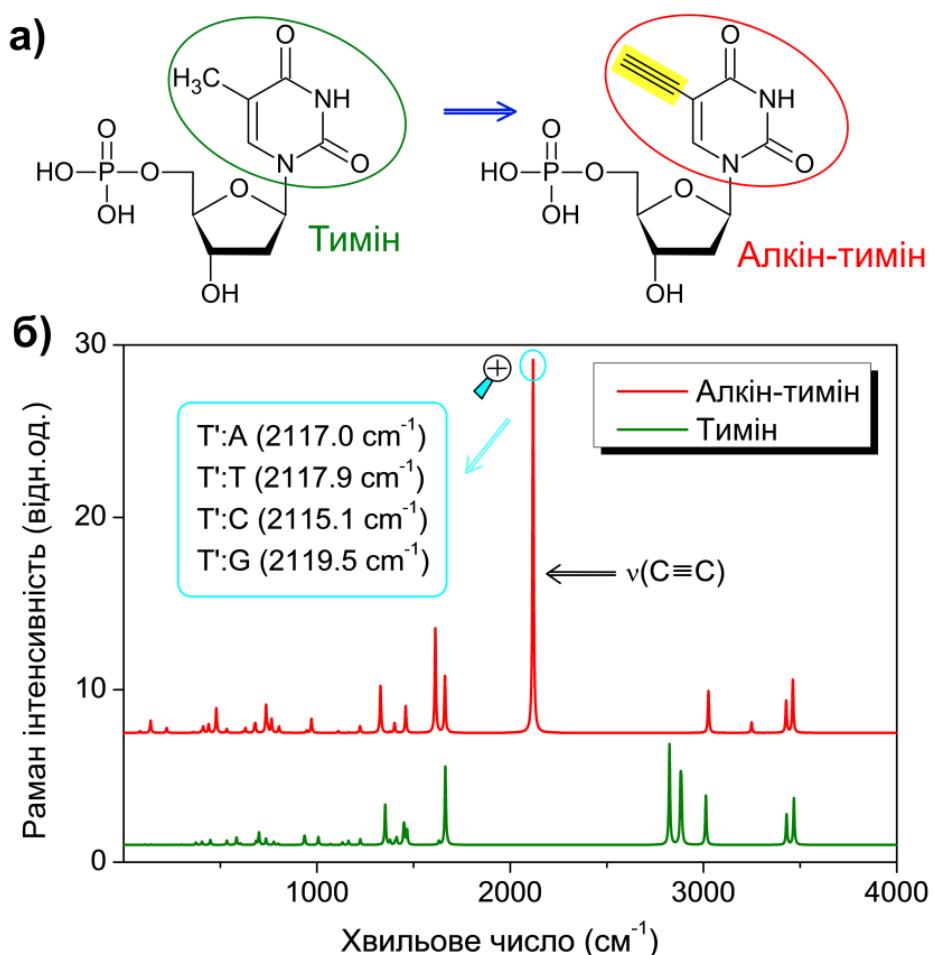


Рис. 1. Модифікація тиміну (а) та змодельовані Раман спектри молекул тиміну і алкін-тиміну (б). На вставці приведено розраховані частоти коливань $C\equiv C$ зв'язку для різних пар основ (Т'- алкін-тимін).

У роботі запропоновано нову методологію для ідентифікації нуклеїнових кислот на рівні послідовностей основ та однонуклеотидних (точкових) варіантів. Використовуючи *ab initio* розрахунки показано, що частота валентного коливання алкінової мітки модифікованої нуклеотидної основи чутлива до типу основи, з якою вона взаємодіє через водневі зв'язки (Рис. 1б). На синтетичних ДНК з інкорпорованим 5-етиніл-2'-дезоксиурідином (EdU – аналог тимідину, який містить

етинільну групу) експериментально встановлено, що частота смуг валентних коливань C≡C зв'язку в модифікованому тимідині (T') є унікальною для різних пар основ (T':A, T':T, T':C і T':G) [1]. Це відкриття дозволило вперше за допомогою високороздільної Раман-спектроскопії ідентифікувати мутацію BRAF V600E, пов'язану з раком простати, а також послідовність геному вірусу SARS-CoV-2 (N-gene region), що викликає інфекційне захворювання COVID-19. Отже, запропонована методологія має значний потенціал та відкриває нові перспективи для подальшого розвитку в галузі ДНК-діагностики.

- [1] J.S. Fossey, M. Veres, H.V. Nguyen, R. Holomb, J.H.R. Tucker, S. Attila, F. Muller. Single point variant detection. (US patent №18/035055, 2024/0011078, Jan. 11, 2024).
<https://www.freepatentsonline.com/y2024/0011078.html>

On the structural self-organisation of semiconducting glasses of the As-S-Ge ternary

D. Tsulyanu

Technical University of Moldova, bd. Dacia 41, Chisinau 2060, MOLDOVA

A brief review of both theoretical and experimental works on elastic properties of chalcogenide glassy semiconductors, which brought to discovery and study of the “intermediate phase” of the glass that arises between the floppy and stressed rigid phases of the same is given. Unusual properties of glassy materials from the intermediate phase (IP), such as the lack of mechanical stress [1] and of aging effects [2], have confirmed their structural self – organization, enhancing the interest for practical application of the same. The particular attention was given to the IP region of As-S-Ge ternary system, which was revealed as one of the largest among known so far. The compositional area and location of the IP inside of compositional triangle of this system have been determined by synthesis and study the reversibility windows for enthalpy relaxation times of glasses along different binary and pseudo-binary lines of this ternary system [3]. The present work is addressed to synthesis and study of glasses from the pseudo-binary line $(\text{GeS}_4)_x(\text{AsS}_3)_{1-x}$, entire located inside the intermediate phase of As-S-Ge system aimed to reveal the degree of the structural self - organization variation by glass composition change, as well as its effect on physical properties of the glass and solid electrolytes based on the same. The glassy alloys $(\text{GeS}_4)_x(\text{AsS}_3)_{1-x}$ of different compositions ($x = 0 \div 1.0$) have been prepared via usual melt-quenched method in vacuum followed by elemental and phase-state analyses that confirmed their glassy state and compositional congruity. As all synthesized compositions belong to intermediate phase means everybody have a more or less self-organized structure, which can be due by large concentration of flexible quasi-tetrahedral (QT)

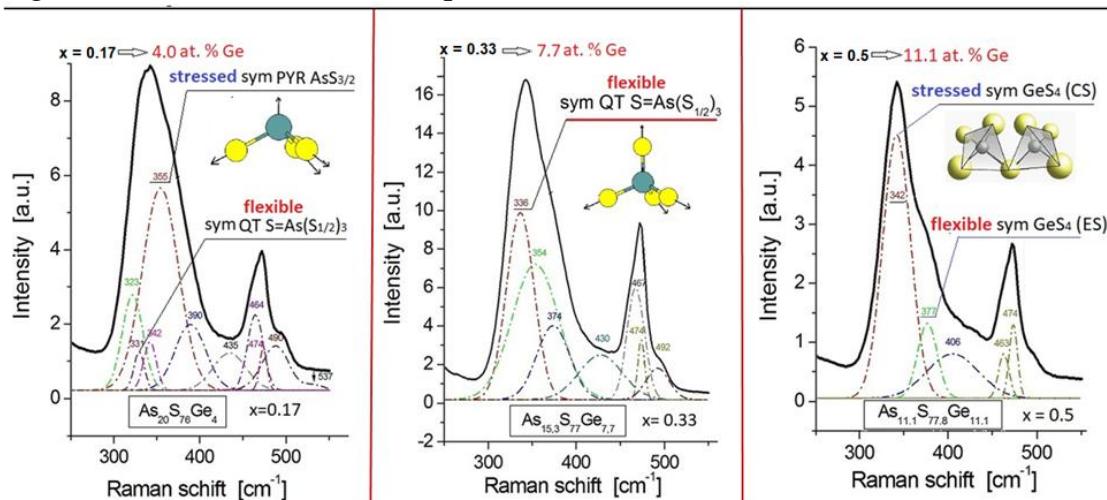


Fig.1. Raman shape – line deconvolution of transition compositions of the $(\text{GeS}_4)_x(\text{AsS}_3)_{1-x}$ glasses. Illustrations are adapted from P. Chen et al.[6] and K. Tanaka, K. Shimakawa [7].

$\text{S}=\text{As}(\text{S}_{1/2})_3$ species, known as facilitating the structural self-organization process [4]. Evidence for this suggestion was revealed via careful analysis of

XRD patterns [5] and Raman spectra that pointed out the deep modifications of both short (SRO) and middle (MRO) range order structure at composition change, conditioned by the formation of either stressed ($\text{AsS}_{3/2}$ and GeS_4) or flexible (QT) $\text{S}=\text{As}(\text{S}_{1/2})_3$ species (Fig. 1). From deconvoluted Raman spectra has been determined the scattering strength of the main structural blocks of glass network and their evolution with composition change [8]. The normalized scattering strengths A_k / A_t of individual (k) Raman modes (A_t is the total area of all modes in the $75 - 550 \text{ cm}^{-1}$ range) arrives displayed versus glass composition on Fig.2 (a). The exclusivity of the properties of chalcogen glass with self-organized structure is also preserved in the related substances, developed or/and manufactured on their basis.

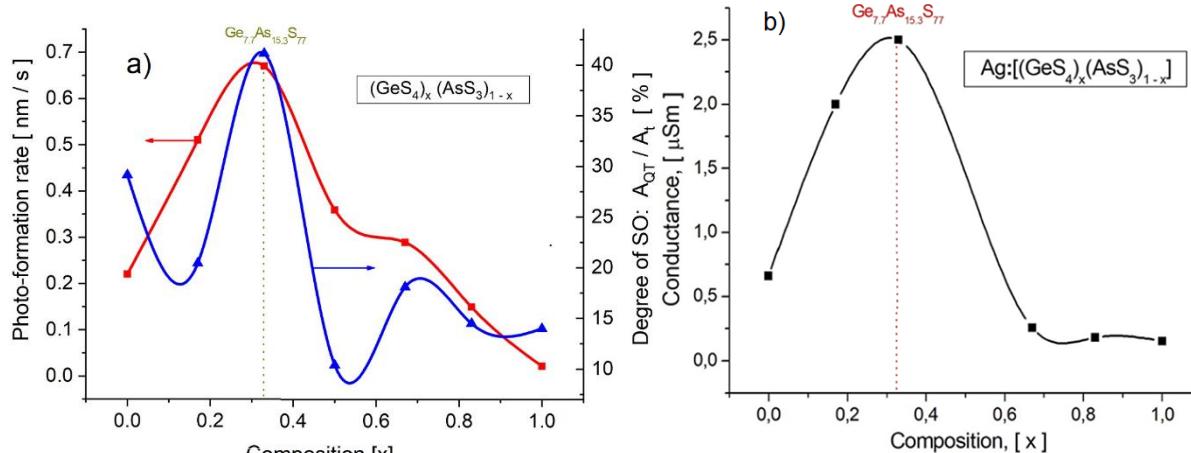


Fig. 2. The degree of the structural self-organization (A_k / A_t) and the rate of solid electrolyte photo-formation (a) as well as the conductance of the last versus glass composition (b).

The photo-dissolution of metals (e.g. Ag), completed with the formation of solid electrolytes with superionic conductivity, takes place through the bi-conductive mechanism and occurs at speeds hundreds and thousands of times higher than in ordinary glasses (Fig. 2a). To the same extent, the electrical conductivity of solid electrolytes made from self-organized chalcogens increases (Fig. 2b).

- [1] F. Wang, S. Mamedov, P. Boolchand, B. Goodman, M. Chandrasekhar, Phys. Rev. B 71 (174201), 1-8 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevB.71.174201.
- [2] S. Chakravarty, D. Georgiev, P. Boolchand, M. Micoulaut, J. Phys.: Condens. Matter. 17, L1–L7 (2005). <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/17/1/L01>.
- [3] S. Chakravarty, B.S. Almutairi, R.Chbeir et al., Phys. Status Solidi B 257 (2020) 2000116 (2-17), <https://doi.org/10.1002/pssb.202000116>.
- [4] M. Micoulaut, Phys. Rev. B 74 (2006) 184208. doi: 10.1103/PhysRevB.74.18420
- [5] D. Tsiulyanu, S. A. Kozyukhin, M. Ciobanu, J. Non-Cryst. Solids, 575 (2022) 121207. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2021.121207>
- [6] P. Chen, C. Holbrook, P. Boolchand, D. Georgiev, K. Jackson, M. Micoulaut, Phys. Rev. B 78, 224208 (2008). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.224208>
- [7] K. Tanaka, K. Shimakawa, Amorphous Chalcogenide Semiconductors and Related Materials, Springer, 2011.
- [8] D. Tsiulyanu, M. Veres, R. Holomb, M. Ciobanu, Journ. Non-Cryst. Solids, 609 (2023)122255, p.1-10. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2023.122255>

Emerging vanadium dioxide memristor-based spiking concepts towards analog neuromorphic event sensing

Denis Flandre, Noémie Bidoul, Grégoire Brandsteert, Jean-Charles Delvenne, Thomas Ratier, Xi Zeng, Léopold Van Brandt

SWIMS ERC project, ICTEAM institute, UCLouvain, Louvain-la-Neuve, Belgium

Event-based detection has emerged as a solution to lower the data rate and energy consumption of sensor arrays, notably in the case of image sensors. However, to combine them with promising spiking neural networks (SNN) for event identification in internet-of-things edge nodes, digital interfaces and spike regeneration circuits are still required, leading to increased resource complexity and power consumption.

In our work, we first investigate how analog spikes could be generated within the sensors themselves towards direct interfacing with neuromorphic processors. We propose a specific implementation, based on vanadium dioxide (VO_2), a phase-change material that exhibits reversible metal-insulator transitions (MIT) at a temperature of about 70 °C. Insulator-to-metal transition (IMT) can also be triggered by applying a voltage across the VO_2 resistor exceeding a certain threshold value (V_{IMT}) and reversely when lowering the voltage below another metal-to-insulator threshold (V_{MIT}). The resulting I-V characteristics are typical of a memristor behavior, featuring a hysteresis in voltage-driven operation or a negative differential resistance (NDR) in current-driven mode.

These behaviors can be leveraged to design oscillators made of a single VO_2 memristor, a bias resistor or current source, and a capacitor. The properties of such oscillators have been measured as a function of VO_2 characteristics, temperature, bias current and capacitor value, and analyzed in terms of average frequency and cycle-to-cycle fluctuations, leading to a potential precision of about 0.1 °C on a hazard temperature threshold of about 45 °C. Similar studies have been carried out notably in EPFL (Switzerland) with respect to other stimuli such as electromagnetic or strain.

Secondly, encoding the sensed stimulus into the rate or frequency of the oscillator is not sufficiently energyefficient. A better encoding can be achieved by sparse spikes or spike trains further used as input for the neurons and synapses of a SNN. The proposed VO_2 -based sensory neuron is reported to operate in this mode when biased below threshold, by exploiting intrinsic noise sources to generate stochastic spike bursts. Their temperature dependence has been measured and characterized. The statistics of the bursts have been observed to follow Poisson distributions, corresponding to more biologically-plausible signals.

Finally, we have adapted a physics-based memristor model to further analyse and discuss the experimental behaviors. This compact model could be used as a tool to design new sensors based on VO₂ memristor targeting ultra low-power consumption (sub-pJ per spike) and bio-plausible signals (towards event-based detection).

Acknowledgments: This work is fully supported by the European Research Council (ERC) under the European Union’s Horizon AG research and innovation program (ERC-Synergy, SWIMS, 101119062) and the FRS-FNRS ‘chargé de recherche’ grant supporting Dr. Van Brandt. The authors thank the staff of the Winfab cleanroom and Welcome characterization platforms in UCLouvain for their support.

Graphitised C:H&C:Nx films with tunable nano/meso-porous morphology fabricated by Magnetron Plasma Enhanced CVD technique as an effective functional layer for gas sensor and catalytic applications

A.N. Nazarov^{1,2}, A.V. Vasin¹, A.V. Rusavsky¹, O.M. Slobodyan¹, Yu.V. Gomeniuk¹, P.M. Okholin¹, P.M. Lytvyn¹, O.I. Gudymenko¹, T.Yu. Sabov¹, D.V. Kysil¹, S.I. Tiagulskiy³, R. Yatskiv³, G.Ya. Kolbasov⁴, I.A. Rusetskii⁴, R.B. Kozakevich⁵, V.S.Lysenko¹

¹⁾*Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

²⁾*National Technical University "Igor Sikorsky KPI", Kyiv, Ukraine.*

³⁾*Institute of Photonics and Electronics CAS, Praha, Czech Republic*

⁴⁾*Vernadsky Institute of General & Inorganic Chemistry, NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

⁵⁾*Chuiko Institute of Surface Chemistry of NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

Porous carbon films are a very attractive material for different fields of applications such as catalysis, energy storage, purification of gases and liquids and chemical gas sensors. It can be base material for nanocomposites formation to increase their catalytic activity. For many applications the porous carbon film has to be conductive, for example, in biomedical electronic devices, chemical sensors operating on electrical resistance response and in catalytic diffusion layer of hydrogen electrolyzer. Combination of porosity and conductivity in such films is a great advantage but it is a big challenge as well. High conductivity in carbon is associated with high concentration of sp² bonds and highly percolated graphitic/graphenic phases. To obtain graphitic phase in the porous carbon films a high temperature annealing in vacuum or nitrogen atmosphere can be used.

In the present work we propose an original method of “magnetron plasma enhanced chemical vapor deposition” (MPECVD) of high-porous amorphous carbon. It will be shown that poor conductivity and chemical sensitivity as deposited films can be strongly enhanced by high temperature vacuum annealing. It is shown that using of different carbon based gases, power of the RF plasma discharge, type of target allows us to strongly change structure, porosity, chemical composition, electrical and optical properties of the porous graphitic carbon materials. Additionally, low-temperature RF plasma treatment in forming gas ambient is proposed to control surface property of the material.

Chemical composition of as-deposited films, high temperature annealed films and low-temperature RF plasma treated ones was examined by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS). The X-ray reflectometric (XRR) technique was used to measure a density, porosity and thickness of the carbon films. Surface morphology was studied by atomic force microscopy (AFM) and scanning electron microscopy (SEM). Optical properties were determined by UV-Vis spectroscopy. Four point probe method was used for the primary

analysis of electrical properties. The gas resistance sensitivity was examined by measurement of resistance between Ni contacts.

It was shown in [1] that MPECVD deposition of carbon film from methane (CH_4) results in formation of highly porous (density – 1.4 g/cm^3 , calculated porosity – 56%) but high resistance ($10^8 - 10^9 \text{ Ohm}\times\text{cm}$) amorphous film with pores size on the surface about 50 nm. Subsequent thermal annealing in vacuum at 600°C formed more dense film (density – 1.6 g/cm^3 , calculated porosity – 27%) with pores size on the surface about 10 nm and considerably less resistance (about $5\times 10^3 \text{ Ohm}\times\text{cm}$). XPS researches demonstrated that after the thermal annealing relation of sp^2/sp^3 carbon bonds in such material reached 5.5. Relative resistance sensitivity to 100 ppm ammonia in chamber was about 0.3%.

Treatment of the thermal annealed graphitized carbon film by nitrogen RF plasma led to nitrogen introduction into carbon film up to 6 at% and to considerably increase of the surface hydrophilicity. Such plasma treatment resulted in increase of resistance gas sensitivity of the film to ammonia in factor two and decrease of the sensitivity to humidity in three times [2].

Adding nitrogen into reactive gas (CH_4) resulted in strong changing of the deposited carbon film structure [3]. Density of the films decreases from 1.28 to 0.90 g/cm^3 in dependence on deposition power. Subsequent thermal annealing in vacuum at 700°C formed less dense film (density – from 0.65 to 0.75 g/cm^3 , calculated porosity – from 60% to 70%). Structure of the films in dependence of deposition power and nitrogen concentration in the gas mixture was changing from sponge-like porous structure to nanorods. XPS measurements shown that CN_x carbon films contain noticeable concentration of sp^3 carbon bonds even after high temperature vacuum annealing. Relative resistance sensitivity to 100 ppm ammonia in chamber was about 1.5% that is in factor 5 more than in case of porous graphitized carbon films.

Highly porous CN_x films was used to form of Pt nanocomposite for hydrogen evolution catalysts for water splitting. The Pt nanocomposite on base of graphitized CN_x porous film contains about 2 at% of nanoclustered Pt and can be used as catalytic layer of cathode in hydrogen electrolyzer. Test on hydrogen generation performed using typical three-electrode cell filled with 1M KOH electrolyte demonstrated that the efficiency is very similar to pure Pt plate with the same area.

[1] O.M. Slobodian, A.V. Rusavsky, A.V. Vasin et al. [Applied Surface Science, V.496](#), 143735 (2019)

[2] O.M. Slobodian, P.N. Okholin, P.M. Lytvyn et al. [Applied Surface Science, V.544](#), 148876 (2021)

[3] A. Vasin, O. Slobodian, A. Rusavsky et al. Journal of Physics D: Applied Physics, V.56 275302 (2023)

Amplification of coherent acoustic pulses in the media with excited optical phonons

S. M. Kukhtaruk, V. A. Kochelap

*Department of Theoretical Physics, V. Ye. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics,
NASU, 03028 Kyiv, Ukraine*

CENTERA Laboratories, Institute of High Pressure Physics PAS, 01-142 Warsaw, Poland

The coupled electron-phonon kinetics determines the electron transport, electrical and optical properties of electronic and optoelectronic devices, as well as hot phonon effects, including hot phonon spots, and heat removal efficiency from the devices. Hot phonon effects lead to a degradation of device characteristics. In high electric fields, the electrons dissipate their energy, exciting high-energy phonons. Typically, the latter are characterized by small group velocities and can not be effectively removed from the working zones of the device through flow mechanisms. Instead, the high-energy phonons decay to yield phonons of lesser energy. In general, the decay processes of high-energy phonons are the “bottleneck” for heat removal and lead to a negative hot-phonon impact on the device’s performance.

On the other hand, picosecond ultrasonics employs ultrafast lasers to generate and detect acoustic waves and pulses with frequencies reaching terahertz and wavelengths as small as nanometers [1]. Recently, it has been demonstrated [2] that acoustic wave packets in the form of strain pulses can be produced by portable, miniaturized picosecond semiconductor lasers that can be integrated into a chip. We demonstrate that by utilizing this technique, one can gain energy from longitudinal optical phonons to amplify coherent acoustic pulses (CAPs) and simultaneously destroy the hot phonons.

We specifically considered the propagation of CAP in the media involving excited longitudinal optical phonons that decay into secondary transverse optical phonons and acoustic phonons. Our findings show that the strong coupling of the secondary phonons results in an instability effect, where energy is transferred from highly excited longitudinal optical phonons. Consequently, the CAP gains energy from optical phonons during its propagation. Figure 1 (a) illustrates the propagation of CAP at various time moments. At $t=0$, the initial CAP exhibits a bipolar form. As time increases, oscillations appear behind the CAP, indicating the instability effect. At $t=100$ ps, the amplitude of these oscillations is smaller than that of the CAP, while at $t=200$ ps, this amplitude exceeds that of the initial CAP. The spatial period of these oscillations is determined by the wavenumber corresponding to the maximum of the instability increment (see Fig. 1 (b)). The amplitude of these oscillations grows exponentially, which could be utilized in amplifiers for coherent acoustic waves.

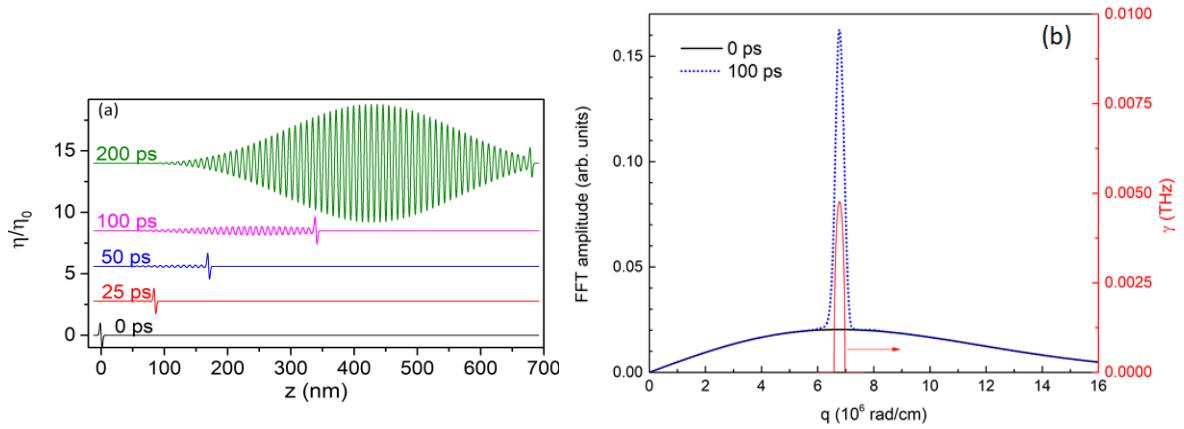


Fig. 1. (a) Propagation of the CAP at various moments of time. (b) Spatial FFT amplitudes of acoustic displacements at $t = 0$ and $t = 100$ ps. The red curve shows the increment of instability for convenience.

Moreover, we demonstrate that the amplitudes of the spatial Fourier components of acoustic displacements increase within the range of wavenumbers where the instability increment is positive, as illustrated in Fig. 1(b). Indeed, at $t=100$ ps, the FFT amplitude of acoustic phonon displacements is already an order of magnitude greater than that of the initial strain pulse. Clearly, at larger times, the FFT amplitude will be significantly larger at these wavenumbers.

The influence of instability is also evident in the displacements of transversal optical phonons. In our analysis of possible energy dissipation in the system, we found that the damping of acoustic phonons plays a minor role in the instability threshold. Conversely, the damping of optical phonons can considerably suppress this instability effect. Thus, realising the instability effect necessitates high-quality materials with low damping of optical phonons. Our findings can contribute to the development of generators and amplifiers for high-frequency coherent acoustic phonons and methods of hot spots destruction.

[1] C. Thomsen, H.T. Grahn, H.J. Maris, J. Tauc, Surface generation and detection of phonons by picosecond light pulses, Phys. Rev. B **34**, 4129 (1986).

[2] M. Kobecki et al., Picosecond ultrasonics with miniaturized semiconductor lasers Ultrasonics **106**, 106150 (2020).

Impedance spectroscopy and ac conductivity mechanism in GeSn Thin Films

Serhiy Kondratenko^{1*}, Oleksandr Datsenko¹, Fernando M. de Oliveira², Serhii Kryvyyi², Kateryna Yablochkova¹, Peter M. Lytvyn⁴, Morgan E. Ware^{2,5}, Serhii Maliuta³, Shui-Qing Yu⁵, Yuriy I. Mazur^{2*}, and Gregory J. Salamo²

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 64 Volodymyrs'ka St. 01601, Kyiv, Ukraine;

² Institute of Nano Science and Engineering, University of Arkansas, Fayetteville, AR 72701, United States of America;

³ National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky KPI", 37 Beresteyskyi av., 03056 Kyiv, Ukraine

⁴V E Lashkaryov Institute of Semiconductors Physics, NAS of Ukraine, 41 pr. Nauki, 03028, Kyiv, Ukraine;

⁵ Department of Electrical Engineering, University of Arkansas, Fayetteville 72701, United States of America.

* kondratenko@knu.ua, *yumazur@uark.edu

Temperature- and frequency-dependent impedance was investigated for GeSn thin films epitaxially grown on Ge/Si substrates. Impedance spectroscopy facilitates identifying the contribution to conductivity of each layer and reveals temperature-dependent relaxation times and AC conductivity behavior, consistent with conduction via hopping mechanisms. Analysis of frequency-dependent AC conductivity, based on Jonscher universal power law, highlights the impact of disorder-induced localized states on electrical conduction. The findings enhance understanding of charge transport in GeSn films, providing insights critical to optimizing their performance in advanced optoelectronic devices.

Acknowledgements

The work is supported by the National Science Foundation of US under award no. EAGER 2423217 and by the National Research Foundation of Ukraine project no. 2023.03/0060.

Optical spectroscopy and perspective applications of semiconductor quantum dots

V. Dzhagan^{1*}, O. Stroyuk², D.R.T. Zahn^{3,4}

¹ V. Lashkaryov Institute of Semiconductors Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Nauky av. 41, 03028 Kyiv, Ukraine,

² Forschungszentrum Jülich GmbH, Helmholtz Institute Erlangen-Nürnberg for Renewable Energy, Immerwahrstraße 2, Erlangen 91058, Germany

³ Semiconductor Physics, Chemnitz University of Technology, Reichenhainer Str. 70, D-09107 Chemnitz, Germany

⁴ Research Center for Materials, Architectures and Integration of Nanomembranes (MAIN), Chemnitz University of Technology, D-09107 Chemnitz, Germany

The progress achieved in synthesis of colloidal semiconductor nanocrystals (NCs) or quantum dots (QDs) over decades has shown an impressive control over their structure, morphology, as well as electronic and optical properties. The invention of this elegant and powerful way of creating new materials and properties was consequently awarded the Nobel Prize in 2023. Optical properties are among most promising and admirable, while optical spectroscopies have been all the way a powerful characterization tool that allowed achieving the necessary structural perfection and electronic level structure. Here, we shortly recall the classical QDs based on II-VI semiconductors, which benchmarked the size-tunable light absorption and emission spectra, as well as (photo)catalytic properties. In more detail, we consider the class of heavy metal-free multinary QDs, such as AgInS₂ and Cu₂ZnSnS₄, and their off-stoichiometry analogs, which have emerged recently as a less toxic alternative to CdSe, PbS, or HgTe, but apparently will have their own application niche. Along with optical absorption and photoluminescence spectroscopy, which are the main optical methods for QD characterization, we discuss the capabilities of Raman scattering in providing specific structural data, as well as spectrally and spatially localized electronic features (resonances) related with the peculiarities of the lattice structure or chemical composition [3,4]. We will illustrate such hybrid nanostructures with several examples, referring to different applications.

Finally, an outlook for the probable emerging applications of QDs and research directions, in particular for solving the challenges faced by optical spectroscopies will be outlined.

*Corresponding author: email: dzhagan@isp.kiev.ua

Peculiarities of long-wavelength plasmons and two-stream instability in double-layer quantum heterostructures

V. N. Sokolov¹, V. A. Kochelap^{1,2}

¹ V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 41, prospect Nauky, 03028 Kyiv, Ukraine, e-mail: sokolov@isp.kiev.ua

² Centera Lab., Institute of High Pressure Physics, Polish Academy of Sciences, Warsaw 01-142, Poland, e-mail: kochelap@ukr.net

The study of plasmons in semiconductor nanostructures is a priority area of theoretical, experimental, and device-oriented works focused on the detection, amplification, and generation of THz radiation. There are currently a few reports for observation of gain effects in a complex configuration of nanostructures at high electrical biases [1-3]. Therefore, a detailed study of the determining factors of amplification phenomena is required.

In this report, we present the results of theoretical investigation of plasmonic properties of heterostructures composed of two parallel semiconductor nanolayers, separated by the interlayer distance d , subjected to the electric current. The electron transport in individual layers is described in the hydrodynamic approach [4], taking into account the self-consistent electrostatic potential and the electron momentum dissipation time τ of the two-dimensional electrons. In applying the standard linearization procedure to the system of coupled hydrodynamic equations and Poisson's equation [4], we derived and solved the dispersion equation for collective charge-density oscillations in the two-layer nanostructure. The obtained solution $\omega = \omega_i(\mathbf{k})$ represents four plasmon branches ($i = 1-4$), which is characteristic for nanostructure consisting of two electrostatically-coupled layers; here, ω and \mathbf{k} are the plasmon frequency (complex) and wave vector (real). These branches depend parametrically on the electron density n , dissipation time τ , and the electron drift velocity v_d in the current-biased layers.

For two identical layers, characterized by the same parameter set (n , τ , v_d), we found that the spectrum of self-oscillations in the system of drifting electrons consists of two optical plasmon (OP) and two acoustic plasmon (AP) modes, which Fourier amplitudes of the electron density oscillations obey the symmetric and antisymmetric relations, $\delta n_{\mathbf{k},\omega}^{(1)} = \delta n_{\mathbf{k},\omega}^{(2)}$ and $\delta n_{\mathbf{k},\omega}^{(1)} = -\delta n_{\mathbf{k},\omega}^{(2)}$, respectively. In the absence of applied electric field (E , $v_d = 0$), the real part of frequency is proportional to $k^{1/2}$ for the OP modes and to k for the AP modes in the long-wavelength limit. When the electric field is applied to the layers ($v_d \neq 0$), then the term with the drift velocity, $v_d k$, appears in the dispersion law, which provides the Doppler shift for both the OP and AP modes.

When one of the layers is biased by the external electric field providing the electron drift velocity v_d , we found interesting peculiarities of long-wavelength plasmons, as well as two-stream-like instability at high v_d -values. Examples of the calculated dispersion curves $\text{Re}[\Omega](q) = \Omega'(q)$ illustrating these peculiarities are presented in Figs. 1 and 2 at given values of v_d and τ (Ω and q are the dimensionless frequency and wave vector, respectively). It is seen (Fig. 1) that for $q < q_m$, there are two degenerate modes $\Omega'_3(q) = \Omega'_4(q)$, characterized by

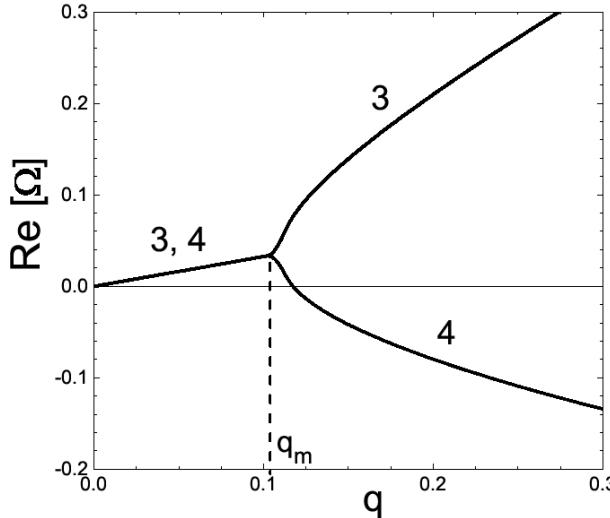


Fig. 1

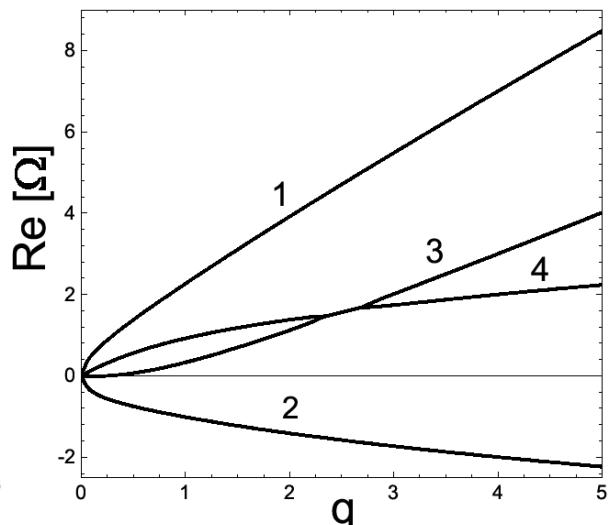


Fig. 2

the linear dispersion caused by the electron drift v_{d1} (τ_1), which split into two different modes for $q > q_m$, demonstrating the wave-vector dependence characteristic for the OPs. In Fig. 2, the dispersion curves $\Omega'_{1-4}(q)$ have been calculated using the parameter values $v_{d2} > v_{d1}$ and $\tau_2 > \tau_1$. The branches $\Omega'_3(q)$ and $\Omega'_4(q)$ demonstrate the crossing and strong interaction, because of which the imaginary part of mode 3 changes the sign in the vicinity of the crossing point leading to the instability. The analysis shows that this instability is the two-stream-like instability [5] caused by the drift of electrons in the system of two coupled nanolayers under the electric field. For numerical estimations, we use the set of parameters corresponding to a GaAs-based heterostructure with the electron density $n = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, the electron effective mass $m = 0.067 m_0$ (m_0 is the free electron mass), the dielectric permittivity $\epsilon = 12.35$, and the interlayer distance $d = 10 \text{ nm}$. Then, from the data of Fig. 1, we obtain that the values of q_m and $\Omega'_{3,4}(q_m)$ correspond to the electron drift velocity in the biased layer $v_{d1} = 0.9 \times 10^7 \text{ cm/s}$, the dissipation time $\tau_1 = 3.6 \times 10^{-13} \text{ s}$, the plasmon frequency $\nu = 0.07 \text{ THz}$, and the wavelength $\lambda = 630 \text{ nm}$. For Fig. 2, the estimations give: $v_{d2} = 1.7 \times 10^7 \text{ cm/s}$, $\tau_2 = 3.6 \times 10^{-12} \text{ s}$, $\nu = 3.5 \text{ THz}$, and $\lambda = 25 \text{ nm}$ (the values of ν and λ are estimated at the mode intersection point).

References

1. D. Svintsov, Phys. Rev. B **100**, 195428 (2019).
2. S. A. Mikhailov, Phys. Rev. B **58**, 1517 (1998).
3. B. Yu-Kuang Hu, J. W. Wilkins, Phys. Rev. B **43**, 14009 (1991).
4. M. Dyakonov, M. Shur, Phys. Rev. Lett. **71**, 2465 (1993).
5. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics. Physical Kinetics* (Pergamon Press Inc., Maxwell House, New York, USA, 1981). V. 10, Ch. 6, p. 276.

Nonlinear dynamics and polar properties of the van der Waals ferrielectric CuInP₂S₆

Yu. Vysochanskii, A. Kohutych, V. Liubachko, R. Yevych,
K. Glukhov, M. Medulych, V. Hryts, M. Pop, A. Pogodin

*Institute for Solid State Physics and Chemistry, Uzhhorod National University, Uzhhorod,
88000, Ukraine, vysochanskii@gmail.com*

The study of two-dimensional ferroelectric materials is a current focus within the fields of condensed matter physics and materials science. The van der Waals (vdW) CuInP₂S₆ crystals, which exhibit out-of-plane spontaneous polarization and ionic conductivity, are of particular interest and have already been proposed for a multitude of applications.

The appearance of spontaneous polarization in CuInP₂S₆ ferroelectrics is related to the second order Jahn-Teller effect for copper cations located in a double-well local potential, and to the stereoactivity of indium cations located in a three-well local potential. The peculiarities of the chemical bonding have been demonstrated [1] by DFT molecular dynamics simulations of the Cu⁺ cation flipping and the displacive dynamics of In³⁺ cations, which allowed us to analyze the paraelectric to ferrielectric phase transition using a mixed Ising model with spins $s = 1/2$ and $S = 1$ [2]. According to calculations of the spectrum of pseudospin fluctuations, in a mean-field approach for the quantum anharmonic oscillator model [3], the lattice anharmonicity of the CuInP₂S₆ crystal below 200 K is mainly determined by the indium sublattice, leading to the coexistence of the glassy state and the ferrielectric phase. The transformation of the ferrielectric phase into the dipole glass state can be considered as an “inverse glass transition”. The degeneracy of the interacting states of the single spins $S = +1, -1$ leads to an entropic preference of the ordered ferrielectric state, while the lower energy associated with the non-interacting states $S = 0$ leads to a “paraelectric state” with decreasing temperature.

Above 200 K, thermal activation of the copper relaxation dynamics can be described as disordering in the $s = 1/2$ spin sublattice, and this process leads to the existence of a long-range fluctuating cluster of spontaneous polarization in a temperature interval of the paraelectric phase above T_c . The relaxation dynamics of the Cu⁺ cations is associated with significant deformations of the (P₂S₆)⁴⁻ anions, causing the buckling of the sulfur sheets adjacent to the vdW gaps. Appeared at such structural disordered entropic preference coincides with the increase of probability for Cu⁺ cations localization inside of the vdW gap, with covalence bonding to the sulfur atoms from the neighboring structural layer. As well, the appearance of unfilled sulfide octahedra leads to an increase in the volume of the sulfide octahedra surrounding the In³⁺ cations, which promotes the switching to a collinear orientation of the electric dipoles of the In³⁺ and Cu⁺ cations. The apparent crossover from the ferrielectric to the

ferroelectric state can induce the polar clusters with increased value of spontaneous polarization. In addition, at room temperature, the compression induces the hopping of Cu⁺ cations into the vdW gap [4], and after decompression the ferroelectric state with enhanced spontaneous polarization can be protected because the locking of the highly buckled structural layers counteracts their relative sliding. An “inverse freezing” occurs, which is related to the coupling of the shear modes of the structural layers with the relaxation of the Cu⁺ cations between sites inside of the structural layers and in the vdW gap.

For the CuInP₂S₆ crystal, the transformation with heating across $T_c \approx 312$ K, which is clearly seen in the Raman spectra below 60 cm⁻¹, and in the frequency range 280 – 340 cm⁻¹ of the micro-Raman spectra (Fig. 1), characterizes the coupling between Cu⁺ cations vibrations and layers shear modes. The thermal conductivity also shows a diffusive-like heat transfer in the low temperature range of the ferrielectric phase. With increasing temperature, an effective suppression of the thermal conductivity is observed due to disorder in the copper sublattice. These observations of the CuInP₂S₆ crystals nonlinear dynamics are important for approving their polar properties.

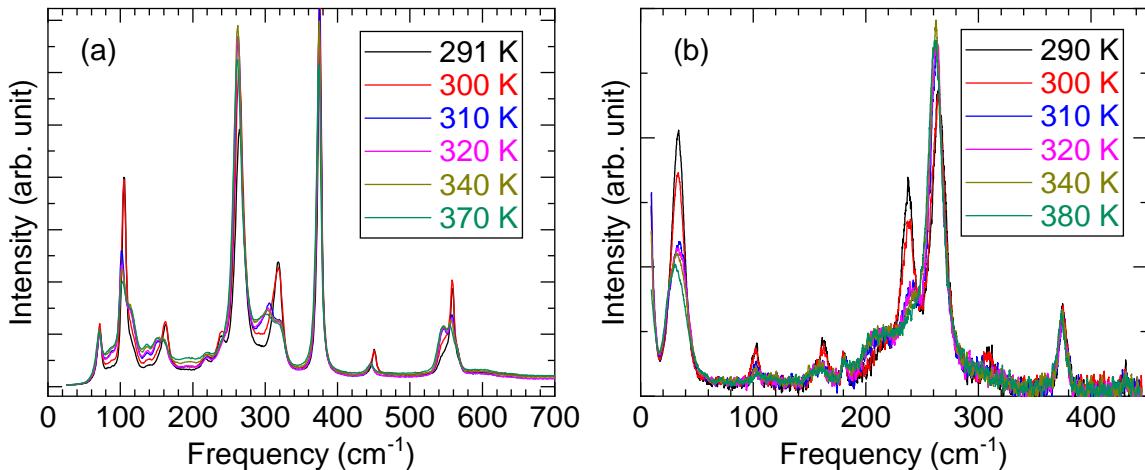


Figure 1. Micro-Raman (a) and Raman (b) spectra for CuInP₂S₆.

Acknowledgment: This work has been supported by the Horizon Europe Framework Programme, project no. 101131229, (PIEZO 2D) and by the external assistance instrument of the EU to fulfill Ukraine's obligations under the European Union Framework Program for Research and Innovation Horizon 2020, no. 0124U004302 (PH/41-2024).

- [1] Yu. Vysochanskii, V. Liubachko, K. Glukhov, R. Yevych, A. Kohutych, V. Hryts, A. Dziaugys, J. Banys. Ferroelectrics. 618, 906 (2024).
- [2] W. Selke and J. Oitmaa, J. Phys.: Condens. Matter. 22, 076004 (2010).
- [3] R. Yevych, V. Liubachko, V. Hryts, M. Medulych, A. Kohutych, Y. Vysochanskii. Condensed Matter Physics. 27, 14701 (2024).
- [4] H. Luo e.a., PNAS. 121, e2416835121(1-7) (2024).

THz properties of plasmonic crystal structures.

V.V. Koroteyev

V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of NAS of Ukraine

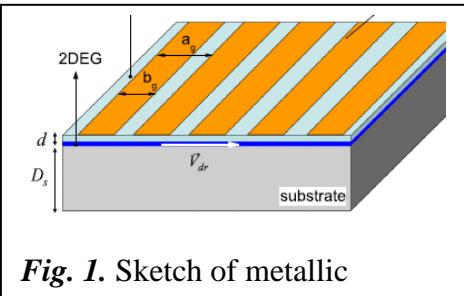


Fig. 1. Sketch of metallic grating-based PC structure with

One of the promising platform for modern THz systems is the plasmonic crystals (PCs) fabricated in the form of quantum well heterostructure covered by grating-gate metasurfaces [Fig.1]. Such PC structures provide essential enhancement of THz light-matter interaction with particular resonant properties associated with excitation of different plasmonic modes. PCs have shown

enhanced performance as THz detectors [1] and hold potential for applications as THz emitters/amplifiers[2], and modulators [3].

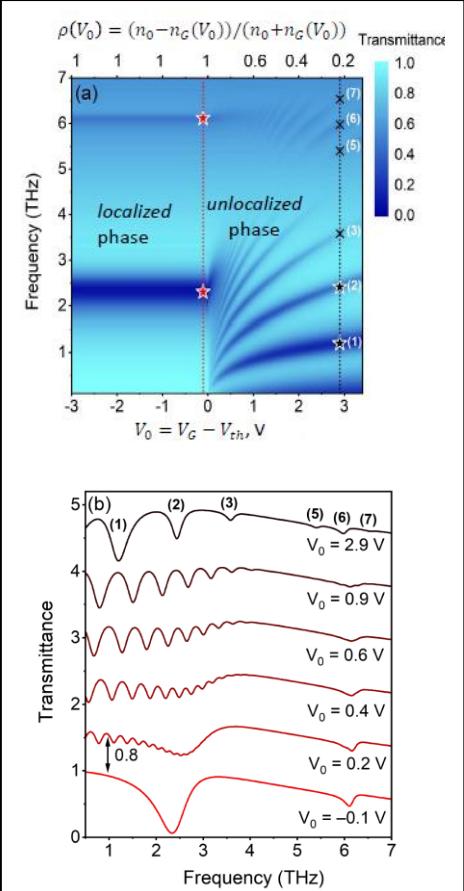


Fig.2 Examples of transmission spectra calculations at different

This thesis addresses to overview of recent experimental and theoretical studies of resonant interaction of plasmon excitation of 2D electron gas (2DEG) with THz electromagnetic waves in PCs. Particularly, several effects concerning a formation of different resonant-plasmonic phases of PC structures, 2D plasmon instabilities under metallic grating, magneto-plasmons, including non-linear effects of self-induced transparency of PCs by high-power picosecond pulses will be highlighted.

Particularly, recent THz Fourier transform spectroscopy experiments revealed the existence of the two so-called resonant phases of PCs electrically controlled by gate-to-channel voltages [3]. We found that first, *localized* phase with multiple resonances is realized at weak modulation of the concentration profile of 2DEG. The second, *unlocalized* phase occurs at strong modulation when a new type of PC –“2DEG strip grating under metallic grating” is formed. Latter is described by existence of the single resonance in the considered

spectral range [see Fig.2]. Rigorous electrodynamic simulation confirmed and explained results of the measurements.

Recently, high-power THz pulse-THz probe spectroscopy measurements of AlGaN/GaN PC structures provided by free electron laser were performed. The non-linear effects associated with pumped induced modification of plasmonic resonant band (spectral position or its width) depending on the intensity of incident THz pulse were identified. This modifications leads to observed phenomena such as self-induced transparency of PCs (see Fig. 3).

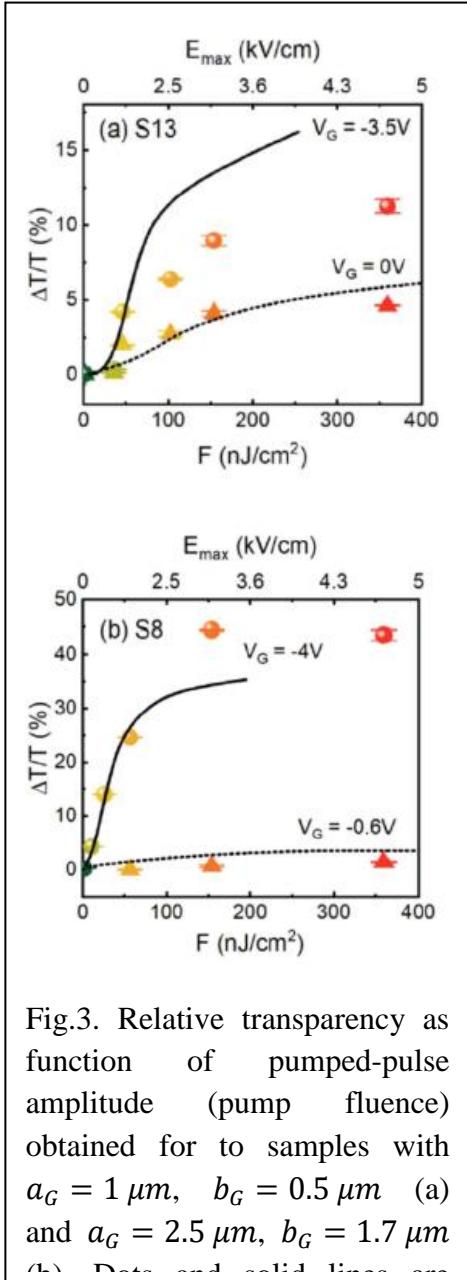


Fig.3. Relative transparency as function of pumped-pulse amplitude (pump fluence) obtained for to samples with $a_G = 1 \mu\text{m}$, $b_G = 0.5 \mu\text{m}$ (a) and $a_G = 2.5 \mu\text{m}$, $b_G = 1.7 \mu\text{m}$

We found that discussed effect becomes stronger for localized PC phase.

The theoretical description of the interaction effects of the high-field pulses with a PC structure is based on coupled solutions of Maxwell's equations and nonlinear electron transport equations. The viscous hydrodynamic transport model is used and takes into account the following: (i) any level of degeneracy of the 2DEG and any lateral profile of electron concentration, (ii) nonlinear field dependences of the electron drift velocity $V_d(E)$ and electron temperature $T_e(E)$; (iii) non-elastic electron-polar optical phonon scattering mechanism (electron-LO scattering); (iv) electron temperature dependences of viscosity and heat conductivity coefficients. Solutions were obtained within specially developed finite-difference time-domain simulator.

Results of simulations and measured data are well agreed for both considered samples and plasmonic phases. The saturation behavior is explained by similar behavior of electron temperature which is inherent for electron transport controlled by optical phonon scattering. The stronger effect for localized phase is due to stronger near-field effects and stronger electron heating.

References:

- [1] V. Popov et al, Plasmonic Terahertz Detection by a Double-Grating-Gate Field-Effect Transistor Structure with an Asymmetric Unit Cell, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 243504 (2011).
- [2] S. Boubanga-Tombet, et al, Room-Temperature Amplification of Terahertz Radiation by Grating-Gate Graphene Structures, *Phys. Rev. X* **10**, 031004 (2020).
- [3] P. Sai, et al, Electrical Tuning of Terahertz Plasmonic Crystal Phases, *Physical Review X*, **13**, 041003 (2023).
- [4] P. Sai et al , Extreme Terahertz Nonlinearity of AlGaN/GaN-based Grating-Gate Plasmonic Crystals. preprint arXiv:2503.02562.

AMORPHOUS CHALCOGENIDE SEMICONDUCTORS: SCIENCE, EDUCATION AND BASIS FOR CO-OPERATION

*Sandor Kokenyesi
Debrecen University, Debrecen, Hungary*

More than 50 years Selenium and S, Se, Te –based amorphous chalcogenide semiconductors serve one of basic platforms for the development of different optical, irradiation-sensitive materials for photonics, including one's for optical recording, imaging, nanofabrication. Besides basic solid state physics results modern micro- nano-structured elements and devices may be fabricated with such materials using photon- electron- particle recording beams. Among the few worldwide known genesis centers is Uzhgorod University, which supplied materials and co-operate with large number of science centers in former Soviet Union. Starting from the 1990-ths intensively grooving scientific co-operation with centers in nearest and later with important western laboratory groups in Germany, USA, Canada, as well as in India was developed. Besides conferences, seminars personal visits, longer works were performed. One of the most fruitful cooperation was developed with Hungary, institutes in Budapest and Debrecen University. The joint materials and high quality instruments serve basis for fruitful work, grants, which supported the efficient involvement of student exchange, PhD works. For example, only at Debrecen University at least five young from Uzhgorod made investigations for their PhD in this direction, hundreds of papers, abstracts, conference presentations were made.

Probably, till 2020-th it was a period of “blooming”, later the attention was directed step by step towards applications of science and instruments in nanotechnology, photonics, sensors, biology, medicine. But now we still see some continuation, interest to amorphous chalcogenides in Czech Republic, USA, Canada, Japan, India and may only hope for appearance of new generation of scientists in this direction in Uzhgorod as well as in Debrecen.

ФОРМУВАННЯ ТА ВЛАСТИВОСТІ GeSn ТА GeSn:C ПЛІВОК НА Si ПІДКЛАДКАХ

В.О. Юхимчук¹, Н.В. Мазур¹, О.Й. Гудименко¹, Т.М. Сабов⁴, В.М. Джаган¹, П.М. Литвин¹,
А.М. Дмитрук², О.В. Косуля¹, О.В. Дубіковський¹, М.Я. Валах¹

¹Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України

²Інститут фізики НАН України

Для створення ефективних випромінювачів та детекторів на основі Si технології в останнє десятиліття інтенсивно вивчаються властивості GeSn плівок з високим вмістом олова, що зумовлено необхідністю трансформації непрямозонної електронної структури Ge в прямоzonну [1]. Отримання структур на основі елементів IV групи із прямою забороненою зоною буде значним кроком в напрямку інтеграції оптичних з'єднань у Si мікросхемах на основі КМОН технології. Теоретичні розрахунки свідчать, що для цього доля Sn в GeSn плівках повинна бути в межах від 6,5 до 10 % [1]. Значний розкид в її оцінці залежить від методів розрахунку та врахуванні або ні впливу на зонну структуру механічних напружень стиску в GeSn плівках, сформованих на Si підкладках. При нормальніх умовах доля Sn, що розчиняється в Ge не перевищує 0,5%, тому для формування плівок з високим вмістом олова використовують нерівноважні методи росту, такі як МПЕ та CVD. Однак, обидва ці методи є дороговартісними та енергозатратними і зазвичай вони не використовуються для промислового виробництва. Тому для формування GeSn плівок нами використовувалися методи термічного та магнетронного напилення. Щоб зменшити локальні напруження, що виникають в Ge гратці при вбудовуванні в неї атомів Sn, які мають більший ковалентний радіус, ми додатково інкорпорували в плівки атоми вуглецю, які мають значно менший ковалентний радіус. Необхідну концентрацію атомів вуглецю обраховували, використовуючи закон Вегарда, згідно якого $a(Ge) = a(Ge_{1-x}Sn_xC_y)$, де $a(Ge)$ – стала гратки германію, $a(Ge_{1-x}Sn_xC_y)$ – стала гратки плівки, x – доля Sn, y – доля C. $Ge_{1-x}Sn_x$ плівки формували магнетронним розпиленням відповідних мішеней на попередньо напилений 100 нм Ge буферний шар на Si підкладці. Сформовані таким чином плівки є аморфними, тому потребують подальших відпалів. Термічні відпалі навіть при відносно не високих температурах призводять до випадання атомів Sn в осад та наступної їх дифузії до поверхні плівки та інтерфейсу з підкладкою. Тому для відпалів ми використовували імпульсні фемто- та наносекундні лазери з довжинами хвиль 800 та 455 нм, відповідно. Густину потужності лазерного випромінювання та частоту сканування підбирали експериментальним шляхом. Для характеризації сформованих $Ge_{1-x}Sn_x$ плівок було використано раманівську спектроскопію, XRD, XPS, CEM та масспектроскопію.

На рис. 1(а) наведено раманівські спектри плівок безпосередньо після напилення (1);

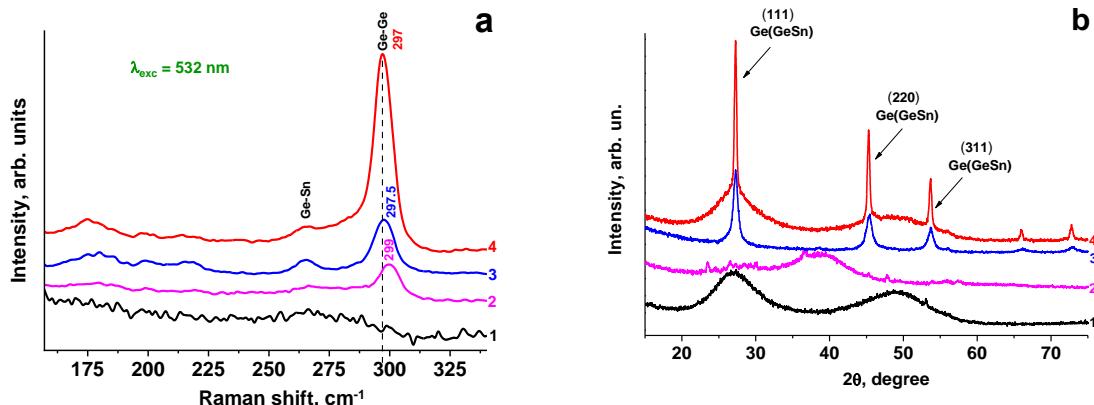


Рис. 1. (а) Раманівські спектри: (1) $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ плівки безпосередньо після осадження; (2) $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ плівки термічно відпаленої при 500 °C; $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ (3) та $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x\text{C}_y$ (4) плівок, відпалених імпульсним наносекундним лазером. (б) Дифрактограми: (1) $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ плівки безпосередньо після осадження; (2) $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ плівки термічно відпаленої при 500 °C; $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ (3) та $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x\text{C}_y$ (4) плівок, відпалених імпульсним наносекундним лазером.

термічно відпалених при температурі 500 °C (2); відпалених наносекундним імпульсним лазером плівок $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ (3) та $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x\text{C}_y$ (4). З їх порівняння можна зробити висновок, що відпал імпульсним лазером в порівнянні з термічним відпалом більш ефективно впливає на кристалізацію плівок, оскільки характеристичні Ge-Ge смуги мають меншу частоту і напівширину. З частотних положень цієї смуги оцінено вміст вбудованих атомів Sn в плівках $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ та $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x\text{C}_y$, який складає 5 та 6 ат. %, відповідно. Наявність вуглецю в плівці не тільки впливає на покращення термічної стабільності $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x\text{C}_y$, але й призводить до додаткового зсуву Ge-Ge смуги в спектрі у високочастотний бік. На рис. 1(б) наведені дифрактограми вищезазначених плівок. Зазначимо, що не вся поверхня плівок відпаливалися лазером, частина її залишалася не відпаленою, тому дифрактограма є суперпозицією X-променевого розсіяння від аморфної та кристалічної частин. Вцілому результати XRD досліджень корелують з раманівськими спектрами.

В роботі також обговорюються особливості відпалу $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ плівок фемтосекундним імпульсним лазером.

1. S. Gupta, B. Magyari-Köpe, Yo. Nishi, K.C. Saraswat Achieving direct band gap in germanium through integration of Sn alloying and external strain. J. Appl. Phys. 2013. 113. P. 073707. <https://doi.org/10.1063/1.4792649>.

Робота підтримана НФДУ проект № 2023.03/0186 «Деформаційна інженерія електронної структури тонких плівок GeSn для ГЧ оптоелектроніки нового покоління».

Role of Mn Ions in Shaping Electronic and Magnetic Properties of Dilute Semiconductor Alloys and Topological Materials

O. Yastrubchak¹, N. Tataryn¹, S. Mamykin¹, V. Romanyuk¹, O. Kondratenko¹, L. Borkovska¹, L. Khomenkova¹, V. Strelchuk¹, A. Nikolenko¹, I. Danylenko¹, X. Liu², B. A. Assaf², J. K. Furdyna², Y. Ichiyangai³, O. Fedchenko⁴, V. Volobuiev⁵, M. Sawicki⁵, J. Sadowski⁵

¹V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 03028, Kyiv, Ukraine

²Department of Physics and Astronomy, University of Notre Dame, IN 46556, USA

³Department of Physics, Graduate School of Engineering Science, Yokohama National University, Yokohama, Kanagawa 240-8501, Japan

⁴Physikalisches Institut, Goethe Universität Frankfurt

⁵Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, 02668, Warsaw, Poland adpeca

Mn-doped dilute multicomponent semiconductors and topological materials represent a unique class of alloys that integrate semiconducting properties with ferromagnetism [1]. This combination results in intriguing physical characteristics with potential applications in both fundamental research and practical device design. By introducing Mn ions into the crystal matrix through doping, it is possible to tailor the band structure and explore innovative device concepts.

In this study, we focus on the (In,Ga,Mn)As [2], (Ga,Mn)(Bi,As) [3], (Ga,Mn)(P,As) [4] and Ni₂MnTe, SnMnTe compounds grown by molecular beam epitaxy (MBE). High-resolution X-ray diffraction (HRXRD) confirmed the crystalline quality of the layers. The incorporation of Mn, Bi and In into crystal lattice of the epitaxial layers expands the lattice parameter perpendicular to the layer plane, increasing the in-plane compressive strain. Conversely, incorporating P into (Ga,Mn)As reduces the lattice parameter perpendicular to the layer plane, thereby decreasing the in-plane compressive strain.

SQUID magnetometry measurements confirmed the ferromagnetic nature of all Mn doped epitaxial layers at low temperatures. The (Ga,Mn)(Bi,As) layers exhibit easy-plane magnetic anisotropy, a characteristic also observed in (Ga,Mn)As layers grown under compressive misfit strain. Magnetization curves at 5 K revealed that the in-plane ⟨100⟩ directions serve as easy magnetization axes in both (Ga,Mn)As and (Ga,Mn)(Bi,As) systems. Notably, tensile-strained (Ga,Mn)(P,As) films grown on GaAs with P doping exhibit ferromagnetism with perpendicular magnetic anisotropy.

Micro-Raman analysis suggests that low-temperature annealing significantly enhances the concentration of free holes and promotes their more uniform distribution within the epitaxial layer. Based on the analysis of experimental optical data, we propose a schematic model of the energy band diagrams for all the epitaxial layers.

Optical properties of the layers were measured by spectroscopic ellipsometry (SE) [5]. The SE experiments were conducted at room

temperature using the SE-2000 Semilab multi-angle spectroscopic ellipsometer (working wavelength range: 250–2100 nm) capable of determining the optical properties of the layers and their thicknesses. From the SE measurements, the spectral dependencies of the ellipsometric angles $\Psi(\lambda)$ and $\Delta(\lambda)$ were obtained, from which the effective complex dielectric function $\epsilon_1 + i\epsilon_2$ was calculated using a structure model of the investigated layered material.

The valence band dispersion and density of states in the epitaxial layers were measured using hard X-ray angle-resolved photoemission spectroscopy (HARPES). HARPES has the advantage of an increased bulk sensitivity, avoiding particularly strong effects of band bending in GaAs caused by native oxide, surface states and by the surface photovoltaic effect. Due to the significant influence of growth conditions and surface cleanliness on the experimental spectra of (Ga,Mn)As, previous studies resulted in contradicting conclusions, by the surface decomposition during annealing and by the high reactivity of Mn.

For example the high-Mn-doped (Ga,Mn)(Bi,As) layers, the impurity band and the host valence band merge into a single inseparable band, whose tail may still contain localized states (shaded parabolas) depending on the free carrier concentration and disorder. The Fermi level lies within the strongly disturbed valence band, which extends into the band gap due to carrier-induced many-body effects. In (Ga,Mn)(P,As), the Fermi level is located within in-gap Mn impurity states, which may be hybridized with the valence band.

O.Yastrubchak acknowledge financial support the IEEE program “2025Magnetism for Ukraine”, supported by the IEEE Magnetic Society under the Science and Technology Center in Ukraine (STCU) framework.

1. Gluba L., **Yastrubchak O.**, Domagala J.Z., Jakielo R., Andrearczyk T., Žuk J., Wosinski T., Sadowski J., Sawicki M. Band structure evolution and the origin of magnetism in (Ga,Mn)As: From paramagnetic through superparamagnetic to ferromagnetic phase. *Physical Review B*. 2018. Vol. 97(11). P. 115201.
2. Medjanik K., Fedchenko O., **Yastrubchak O.**, Sadowski J., Sawicki M., Gluba L., Vasilyev D., Babenkov S., Chernov S., Winkelmann A., Elmers H.J., Schönhense G. Site-specific atomic order and band structure tailoring in the diluted magnetic semiconductor (In,Ga,Mn)As. *Physical Review B*. 2021. Vol. 103. P. 075107.
3. **Yastrubchak O.**, Tataryn N., Gluba L., Mamykin S., Sadowski J., Andrearczyk T., Domagala J.Z., Kondratenko O., Romanyuk V., Fedchenko O., Lytvynenko Y., Tkach O., Vasilyev D., Babenkov S., Medjanik K., Gas K., Sawicki M., Wosinski T., Schönhense G., Elmers H. J. Influence of Bi doping on the electronic structure of (Ga,Mn)As epitaxial layers. *Scientific Reports*. 2023. Vol. 13(1), P. 17278.
4. **Yastrubchak O.**, Riney L., Powers W., Tataryn N., Mamykin S., Kondratenko O., Romanyuk V., Borkovska L., Kolomys O., Khomenkova L., Wang J., Liu X., Furdyna J.K., Assaf B.A. Band engineering of magnetic (Ga,Mn)As semiconductors by phosphorus doping. *IEEE Transactions on Magnetics*. 2023. Vol. 59(11). P. 1-6. Art no. 1600106.
5. Gluba L., **Yastrubchak O.**, Sek G., Rudno-Rudziński W., Sadowski J., Kulik, M., Rzodkiewicz W., Rawski M., Andrearczyk T., Misiewicz J., Wosinski T., Žuk J. On the nature of the Mn-related states in the band structure of (Ga,Mn)As alloys via probing the E_{-1} and $E_{-1} + \Delta_1$ optical transitions. *Applied Physics Letters* 2014. Vol. 105(3). P. 032408.

Плоско-фокусувальна оптика для напівпровідниковых концентраторних сонячних фотоперетворювачів

Крючин А.А., Антонов Є.Є., Зенін В.М.

*Інститут проблем реєстрації інформації НАН України,
Україна, 03113, м. Київ, вул. М.Шпака, 2. E-mail: kryuchyn@gmail.com*

Сонячні концентраторні фотоелектричні перетворювачі (ФЕП) сьогодні широко використовуються для генерування електрики [1-2]. Основною перевагою таких систем порівняно з традиційними кремнієвими ФЕП є економія фотоелектричних матеріалів, яка прямо пропорційна кратності k_C концентрування сонячного світла і може перебільшувати навіть $k_C = 500-1000$ [3]. Також є можливість використання в сонячних модулях багато-каскадних напівпровідниковых матеріалів на основі арсеніду галію з ефективністю 40-45 %, що майже втрічі перевищує такий коефіцієнт для кремнію (16-25 %).

Зазвичай концентрування сонячного світла в існуючих сонячних модулях здійснюється традиційними плоскими лінзами Френеля, які створюють на поверхні фотоперетворювача нерівномірне освітлення, розподіл якого близький до гаусового. Це призводить до генерування різної напруги по поверхні ФЕП, внаслідок чого виникають небажані бічні омічні втрати електрики, а також виникає значний додатковий нагрів поверхні модуля. Тому запропоновано різні конструкції оптичних систем для гомогенізації освітлення поверхні ТЕП [4], найчастіше з використанням двох-лінзової або полігональної оптики [5], які досить коштовні і складні для практичного масового виготовлення.

В нашому інституті розроблено плоскі жорсткі мікропризмові лінзи Френеля [3], які створюють в фокальній площині фотоприймача практично гомогенне освітлення необхідного розміру і тому повністю усувають зазначені проблеми. Фокусна відстань таких плоско-фокусувальних лінз може бути будь-якою в межах критичних заломлюючих кутів мікропризм. Для масового тиражування створених плоско-фокусувальних лінз розроблено алгоритми моделювання параметрів матриць таких лінз і методом прецизійного алмазного мікроточіння (АМТ) виготовлено з спеціального алюмінієвого сплаву W-95 штамп-матриці для формування методом термопресування необхідної кількості фінішних виробів з оптичного полікарбонату [6].

Загальний вигляд однієї з виготовлених таких штамп-матриць #31m для формування лінз сонячного модулю з кратністю концентрації $k_C = 280$ (а), зображення сформованої з використанням цієї матриці відповідної лінзи #31m-#06 (б) та форма фокальної світлової плями радіусом $r_V = 1,5$ мм на екрані для номінального фокусу $f_0 = 40$ мм для цієї лінзи в пройденому паралельному колімованому потоці (зовнішнє світлове коло діаметром $D_S = 59$ мм) від діагностичного "зеленого" лазера з довжиною хвилі $\lambda = 0,532$ нм (в) наведено на рисунку 1.

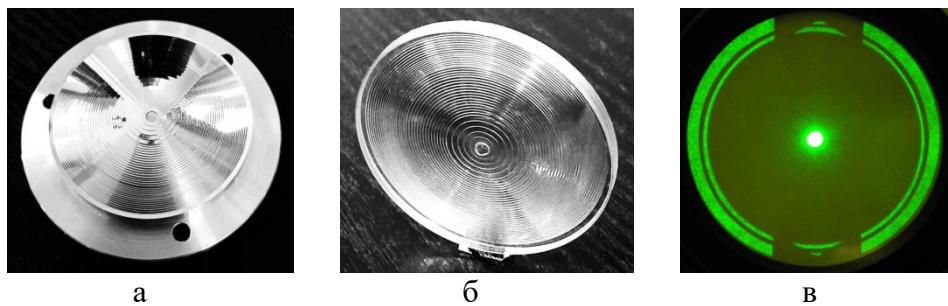


Рисунок 1. Матриця #31m (а), лінза #31m-#06 (б), фокальна пляма (в)

Розподіл освітленості на екрані для цієї лінзи #31m-#06 для різних відстаней спостереження $L=39$ (а), 40 (б) та 41 мм (в) наведено на рисунку 2. Профілі отримано за допомогою програми *Image J 1.53* [6]. Для номінальної відстані $L_0=f_0=40$ мм профіль практично гомогенний, при навіть невеликих змінах відстані L профілі істотно змінюються.

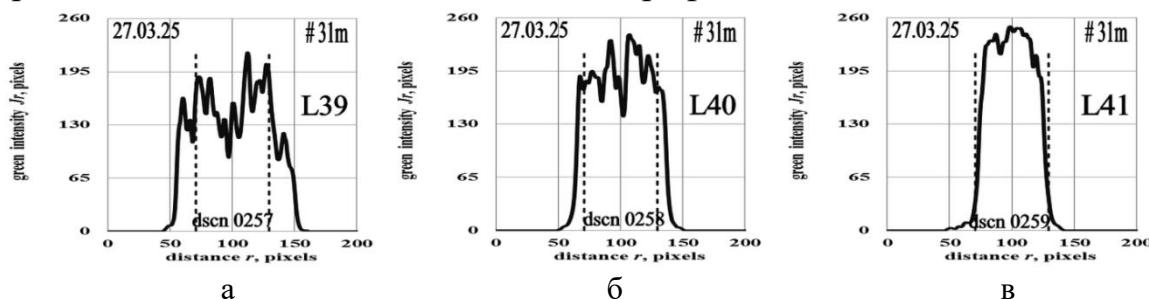


Рисунок 2. Профілі зображень для лінзи #31m-#06: $L=39$ (а), 40 (б), 41 мм (в)

Таким чином, створено мікропризмові плоско-фокусувальні лінзи, які можна використовувати в концентраторних сонячних модулях для досягнення оптимального режиму освітленості поверхні ТЕП.

1. Xie W.T., Dai Y.I., R.Z. Wang R.Z., Sumathy K. Concentrated solar energy applications using Fresnel lenses: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2011. V.15. P. 2588-2606. <http://doi.org/10.1016/j.rser.2011.03.031>.
2. Baig H, Heasman KC, Mallick TK. Nonuniform illumination in concentrating solar cells. *Renew Sustain Energy Rev*. 2012. V.16. P. 5890–5909. <http://doi.org/10.1016/j.rser.2012.06.020>.
3. Antonov E.E., Kondratenko S.V., Lysenko V.S., Petrov V.V., Zenin V.N. Microprismatic plane-focusing Fresnel lenses for light concentration in solar photovoltaic modules. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics*, 2023. V.26, # 2. P.188-200. <https://doi.org/10.15407/spqeo26.02.188>.
4. Jin N.T.Y., Lim Z.H., Zhou G., Liu K., Kumar A.S. Design and fabrication of composite polygonal Fresnel lenses. *Optics Express*. 2021. V.29, No.22. # 436290. P. 36516-36534. <https://doi.org/10.1364/OE.436290>.
5. Benítez P., Minano J.C., Zamora P., Mohedano R., Cvetkovic A., Buljan M., Chaves J., Hernández M. High performance Fresnel-based photovoltaic concentrator. *Optics Express*, 2010. V.18, No.S1. #122958, P.A25-A40. <https://doi.org/10.1364/OE.18.000A25>.
6. Fu M.L., Antonov E.E., Lysenko V.S., Petrov V.V., Zenin V.N. Uniform Illumination of Concentrated Sunlight in Photovoltaic Solar Modules with Plane-Focusing Fresnel Lenses. *IEEE Photonics Journal*, 2024. V.16, No.3, #5000511. P.1-11. <https://doi.org/10.1109/JPHOT.2024.3402070>.

Гетероструктура CuInP₂S₆-2D MoS₂ – SiO₂ як основа для створення польових транзисторів з підпороговим розкидом, нижчим від Больцманової межі

Стріха М.В.^{1,2}, Морозовська Г. М.³, Височанський Ю. М.⁴

¹ Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, ф-т радіофізики, електроніки і комп’ютерних систем, пр. Акад. Глушкова 42, 03022 Київ, Україна

² Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН, пр. Науки 41, 03028 Київ, Україна. E-mail: maksym.strikh@gmail.com

³ Інститут фізики НАН, пр. Науки 46, 03028 Київ, Україна

⁴ Інститут фізики і хімії твердого тіла Ужгородського національного університету, 88000 Ужгород, Україна

Підпороговий розкид S є фундаментальною характеристикою транзисторів метал-діелектрик-напівпровідник, яка показує, у скільки разів треба збільшити напругу на затворі V_g у підпороговій області для того, щоб досягнути збільшення струму на стоку I_d на порядок:

$$S \equiv \ln 10 \frac{dV_g}{d(\ln I_d)}. \quad (1)$$

Відомо, що за кімнатної температури в якісному транзисторі з великим значенням підзатворної ємності граничне значення цього параметру дорівнює:

$$S_o \equiv \ln 10 \frac{kT}{e} \approx 60 \text{ мВ/декада.} \quad (2)$$

де e – заряд електрона, k – стала Больцмана, T – температура в градусах Кельвіна.

Важливість цього параметра полягає в тому, що його найменша гранична величина, т.зв. Больцманова межа, визначає мінімально можливу робочу напругу живлення транзистора. Тому зменшення S нижче від фундаментальної межі S_o теоретично відкривало б великі перспективи для дальнього зниження енергоспоживання та мініатюризації транзисторів.

З цією метою, зокрема, було запропоновано використати ефект негативної ємності в сегнетоелектрику, що формує шар підзатворного діелектрика (див. напр. [1] і наведену там літературу), а також застосувати т.зв. «холодний метал», де стани емітованих у канал електронів обмежені згори за енергією, як матеріал для витоку транзистора (див. напр. [2] і наведену там літературу).

У [3] на основі аналітичних розрахунків ми показали, що структура, зображенна на рис.1а, що включає Ван дер Ваальсів сегнетоелектрик CuInP₂S₆, канал 2D-напівпровідника MoS₂ і шар діелектрика SiO₂, є перспективною з погляду контролюваного зниження

її ємності через виникнення стану негативної ємності в CuInP_2S_6 . Чисельне моделювання вказує на значний вплив стану поляризації та доменної структури CuInP_2S_6 на електропровідність 2D- MoS_2 . Фізика процесу негативної ємності в шарі CuInP_2S_6 обумовлена наявністю метастабільних станів спонтанної поляризації.

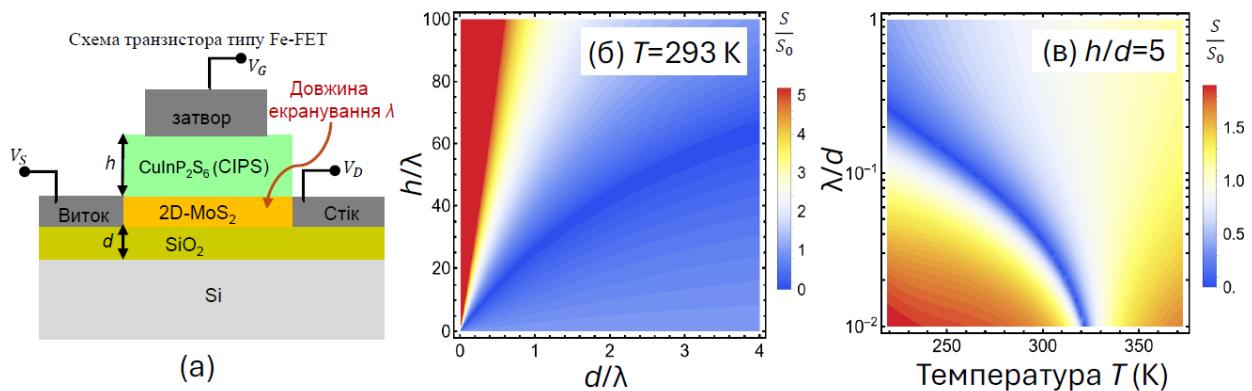


Рис. 1. (а) Fe-FET, що містить CuInP_2S_6 та MoS_2 . Залежність S/S_0 від h/λ та d/λ (б) та від λ/d і температури (в).

Результати моделювання, зображені на рис.1б,в, показують наявність областей співвідношень значень параметрів товщин шарів сегнетоелектрика CuInP_2S_6 h і діелектрика SiO_2 d , а також довжини екранування λ в каналі 2D-напівпровідника MoS_2 , для яких при кімнатній температурі $S/S_0 < 1$, а отже підпороговий розкид (1) є нижчим від Болтьманової межі (2). Цей результат може мати важливе прикладне застосування для масштабування транзисторів.

Робота Г.М.М. фінансується НФД України (грант N 2023.03/0132 «Багаторазово вироджені метастабільні стани спонтанної поляризації в нанофероїках: теорія, експеримент та перспективи цифрової наноелектроніки»).

1. Е. Єлісеєв, Г. Морозовська, Л. Юрченко, М. Стріха. Чи можна використовувати ефект негативної ємності у польових транзисторах із сегнетоелектричним затвором? // Фізика і хімія твердого тіла. – 2022. – т.23, №4. – С.705-713. <https://doi.org/10.15330/pcss.23.4.705-713>

2. М.В.Стріха, К.О.Корж. Аналітична модель для підпорогового розкиду в MOSFET з витоком на основі холодного металу // Сенсорна електроніка і мікросистемні технології. 2023. - 20, № 3. – С.30 – 37. <https://doi.org/10.18524/1815-7459.2023.3.288157>

3. Anna N.Morozovska, Eugene A.Eliseev, Yulian M.Vysochanskii, Sergei V.Kalinin, Maksym V.Strikha. Size Effect of Negative Capacitance State and Subthreshold Swing in Van der Waals Ferrielectric Field-Effect Transistors // Advanced Electronic Materials. – 2024. – article number 2400495. – P.1-17; <https://doi.org/10.1002/aelm.202400495>

Positron annihilation and AI-driven methodology in biosensing

T. Kavetskyy^{1,2,3}, A. Tuzhykov³, Y. Kukhazh¹, N. Hoivanovych¹, P. Grozdov¹, O. Šauša^{2,4}, B. Zgardzińska⁵, J. Warowna⁵, V. Soloviev^{3,6}, A. Kiv^{3,7}

¹Drohobych Ivan Franko State Pedagogical University, 82100 Drohobych, Ukraine

²Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences, 84511 Bratislava, Slovakia

³South-Ukrainian K.D. Ushynsky National Pedagogical University, 65020 Odesa, Ukraine

⁴Department of Nuclear Chemistry, FNS, Comenius University, 84215 Bratislava, Slovakia

⁵Institute of Physics, Maria Curie-Skłodowska University, 20-031 Lublin, Poland

⁶Kryvyi Rih State Pedagogical University, 50086 Kryvyi Rih, Ukraine

⁷Ben-Gurion University of the Negev, 84105 Beer-Sheva, Israel

e-mail: kavetskyy@yahoo.com

The positron annihilation lifetime spectroscopy (PALS) technique is considered non-destructive and widely used to study polymers' nanostructure, carrying information about the influence of external factors such as temperature or humidity on the size and concentration of nanovolumes – local free (electron-less) spaces near and between polymer chains. In the free volumes present in the medium, positronium (Ps) can form, and the lifetime of the triplet state (*o*-Ps) correlates with the size of the free volumes.

Free volume plays a special role in polymer materials, which are the basis for development of modern biosensors. In the process of manufacturing the device, it is necessary to pay attention to the structural aspects associated with free volume and adsorption properties in the sample that have specified structural and electronic characteristics. Ureasil-based and linseed or soybean oil and vanillin-based photocross-linked polymers, microporous carbon fibers and mesoporous titanium dioxide doped with sulfur nanocomposites were selected as immobilizing matrixes in construction of amperometric laccase biosensors for the analysis of phenolic derivates in the wastewater and/or drinking water [1-15]. The network properties (free volume and crosslinking) of the investigated polymers studied using PALS and swelling measurements, were taken into account for comparative analysis. A correlation of network properties of polymer matrixes with parameters of amperometric biosensors is found to be universal. The topological, chemical and topological-chemical mechanisms for effective enzyme immobilization at the construction of amperometric biosensors are established using the investigated materials.

Artificial intelligence (AI) methods were applied to enhance the design and characterization of the amperometric biosensors [16, 17]. Our computational approach employs machine learning of interatomic potentials (MLIP) to model enzyme-polymer interactions at the molecular level. Using a deep neural network architecture similar to DeepDFT, we generate electron density predictions for various polymer matrixes to identify optimal enzyme binding sites. The workflow includes structure generation, geometry optimization, and electronic structure analysis implemented in Python with

the Atomic Simulation Environment (ASE). Initial polymer-enzyme configurations are created and then relaxed using the FIRE algorithm with a force convergence criterion of 0.01 eV/Å. This computational framework enables prediction of structural and electronic changes upon enzyme immobilization, correlating directly with biosensor sensitivity parameters. By applying this AI-driven methodology, we can efficiently screen candidate materials for specific analyte detection and optimize the functional characteristics of the biosensor for real-time monitoring of water pollution without extensive experimental testing.

Acknowledgments

This work was supported in part by the Ministry of Education and Science of Ukraine (projects Nos. 0122U000850, 0122U000874, 0122U001694, 0123U103572, 0124U003406, 0125U001054, 0125U002005, and 0125U002033), Polish National Agency for Academic Exchange NAWA (project No. BPN/BUA/2021/1/00157/U/00001), National Research Foundation of Ukraine (project No. 2020.02/0100), Slovak Grant Agency VEGA (projects Nos. 2/0166/22 and 2/0131/25), and Slovak Research and Development Agency (project No. APVV-21-0335). T.K. and Y.K. acknowledge the SAIA for scholarships in the Institute of Physics of Slovak Academy of Sciences in the framework of the National Scholarship Programme of the Slovak Republic. This work has also received funding through the MSCA4Ukraine project (grant No. 1128327), which is funded by the European Union, and the EURIZON project (grant EU-3022), which is funded by the European Union (EURIZON H2020 project) under grant agreement No. 871072. The authors would also like to thank all collaborators for valuable assistance in experiments and discussions.

- [1] T. Kavetskyy *et al.*, J. Appl. Polym. Sci. **134** (2017) 45278.
- [2] T. Kavetskyy *et al.*, Acta Phys. Pol., A **132** (2017) 1515
- [3] T. Kavetskyy *et al.*, Eur. Polym. J. **115** (2019) 391.
- [4] T. Kavetskyy *et al.*, Mater. Sci. Eng. C **109** (2020) 110570.
- [5] T. Kavetskyy *et al.*, Acta Phys. Pol., A **137** (2020) 246.
- [6] M. Goździuk *et al.*, Acta Phys. Pol., A **139** (2021) 432.
- [7] T. Kavetskyy *et al.*, Bioelectrochemistry **147** (2022) 108215.
- [8] M. Goździuk *et al.*, Materials **15** (2022) 6607.
- [9] D.P. Královič *et al.*, Chem. Pap. **77** (2023) 7257.
- [10] D.P. Královič *et al.*, J. Polym. Environ. **32** (2024) 2336.
- [11] T. Kavetskyy *et al.*, Microchem. J. **201** (2024) 110618.
- [12] T.S. Kavetskyy *et al.*, Phys. Chem. Solid State **25**(3) (2024) 461.
- [13] A.E. Kiv *et al.*, SPQEO **27**(3) (2024) 366.
- [14] E. Leonenko *et al.*, Inorg. Chem. Commun. **175** (2025) 114125.
- [15] T. Kavetskyy *et al.*, NATO Science for Peace and Security B, Chapter 39, 2025, <https://link.springer.com/book/9789402423150>.
- [16] A. Tuzhykov *et al.*, NATO Science for Peace and Security B, Chapter 4, 2025, <https://link.springer.com/book/9789402423150>.
- [17] A. Kiv *et al.*, NATO Science for Peace and Security B, Chapter 6, 2025, <https://link.springer.com/book/9789402423150>.

*In memory of Ivan Blonskyi,
the founder of the “Laser Femtosecond Complex”*

Femtoseconds for semiconductors

Andriy Dmytruk, Igor Dmytruk, Viktor Kadan

Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv 03028, Ukraine

The Laser Femtosecond Complex (LFC) is the Center for collective use of equipment of NAS of Ukraine within the Institute of Physics [1]. The LFC was founded in 2005 for fundamental research and applied laser technologies in the field of interaction of ultrashort (~ 150 fs) powerful (up to 10 GW) pulses of light (fundamental wavelength of 800 nm, 2nd and 3rd harmonics in UV, parametric amplification in IR) with matter, as well as for education and training of graduate and PhD students in the fields of laser physics, ultrafast spectroscopy, and material processing [2].

Several optical research techniques have been elaborated at the LFC: pump-probe for transient absorption [2], Kerr-gate for ultrafast secondary emission [3], time-resolved polarization microscopy and shadowgraphy for direct observation of space-time transformations of a femtosecond laser pulse in transparent media [4], z-scan and low-frequency loss modulation technique for nonlinear-optical measurements [5], and others.

As for semiconductors, the femtosecond laser processing provides a unique possibility for “cold” (nonthermal) ablation, which is based on Coulomb explosion phenomenon. As the excitation of a material (namely, of its electron subsystem) by a femtosecond laser pulse occurs faster than heat dissipation (vibrations of nuclei), such processing allows precise (submicron) formation of surface structures on a semiconductor material without disturbing its bulk, and so its electronic structure. Laser-induced periodic surface structures (LIPSS) on semiconductors attract much attention as potentially simple way to join electronic and optical elements within the same production technology, but also – more practically – for coloring (darkening) elements, for example, solar panels.

Silicon as a fundamental semiconductor technology material has been extensively studied at LFC. Namely, the impact of wavelength, intensity and polarization on the morphology of LIPSS on Si has been demonstrated [6], a real-time optical diagnostic method of the LIPSS formation has been suggested [7], polarization and kinetics of the emission, which accompany the ablation, have been studied in details [8]. Features of surface structuring of direct and indirect band gap semiconductors by femtosecond laser have been investigated [9]. For GaAs wafer coated with semitransparent gold (Au) film, the results of direct femtosecond laser structuring are presented recently [10].

Not only surface but also bulk of a semiconductor material can be directly processed by femtosecond laser. For example, waveguides can be formed deep in Si [12] and in glassy As₄Ge₃₀S₆₆ [13].

Here are just a few of the results of using femtosecond lasers to study semiconductors. More details will be provided in the presentation. And even more discoveries await. The LFC welcomes collaboration!

1. <http://www.iop.kiev.ua/ua/lazernij-femtosekundnij-kompleks/>
2. I. В. Блонський, М. С. Бродин, А. П. Шпак. Широкодіапазонний лазерний фемтосекундний комплекс і можливості його використання. Укр. фіз. журн. (Огляди) 2006, 3(2), 93-125.
3. I. Dmitruk, Ye. Shynkarenko, A. Dmytruk, D. Aleksuk, V. Kadan, P. Korenyuk, N. Zubrilin, and I. Blonskiy. Efficiency estimates and practical aspects of optical Kerr gate for time-resolved luminescence spectroscopy. Methods Appl. Fluoresc. 2016, 4(4), 044007.
4. Ультракороткі надпотужні світлові імпульси в конденсованих середовищах. I. В. Блонський, В. М. Кадан; НАН України, Ін-т фізики. — Київ : Наук. думка, 2017.
5. V. Kadan, I. Pavlov, A. Dmytruk, I. Blonskyi, T. Pavlova, Yu. Serozhkin, A. Goodarzi, M. Bondar. Single-beam low-frequency loss modulation technique for two-photon absorption measurement. Optics Communications 2024, 130809.
6. A. Karlash, A. Dmytruk, I. Dmitruk, N. Berezovska, Ye. Hrabovskyi, I. Blonskyi. The impact of wavelength, intensity and polarization on the morphology of femtosecond laser induced structures on crystalline silicon surface. Applied Nanoscience 2022, 12 (4), 1191-1199.
7. A. Dmytruk, I. Dmitruk, N. Berezovska, A. Karlash, V. Kadan, I. Blonskyi. Emission from silicon as real time figure of merit of LIPSS formation. Journal of Physics D: Applied Physics 2021, 54, 265102.
8. A. Dmytruk, D. Proskuriakov, A. Karlash, M. Dmytruk, I. Dmytruk, V. Kadan, I. Blonskyi, M. Bondar. Polarization and kinetics of optical emission during laser induced periodic surface structure formation on crystalline silicon. Opt. Laser Technol. 2024, 177, 111073
9. N. I. Berezovska, I. M. Dmitruk, Ye. S. Hrabovskyi, R. S. Kolodka, O. P. Stanovy, A. M. Dmytruk, and I. V. Blonskyi. Features of surface structuring of direct and indirect band gap semiconductors by femtosecond laser. Chapter 28 of Springer Proceedings in Physics 280, pp.397–417 (2023).
10. I.M. Dmytruk, N.I. Berezovska, Ye.S. Hrabovskyi, I.P. Pundyk, S.V. Mamykin, V.R. Romanyuk, A.M. Dmytruk. The influence of ultrafast laser processing on morphology and optical properties of Au-GaAs composite structure. Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics 2024, V. 27, No 3. P. 261-268.
11. I. Pavlov et. al. "Optical waveguides written deep inside silicon by femtosecond laser" 2017 CLEO/Europe-EQEC, Munich, Germany, p.1.
12. I. Blonskyi, V. Kadan, O. Shpotyuk, M. Iovu, P. Korenyuk, I. Dmitruk. Filament-induced self-written waveguides in glassy As₄Ge₃₀S₆₆. Appl Phys B (2011) 104:951–956.

НЕЛІНІЙНА ОПТИКА НАПІВПРОВІДНИКІВ

Фекешгазі І.¹, Міца В²., Кут В²., Голомб Р.^{2,3}, Вереш М.³

¹*Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України,
03028, Україна, Київ, просп. Науки, 41*

²*Ужгородський національний університет,
88000, Україна, Закарпатська обл., м. Ужгород, пл. Народна, 3,*

E-mail: mitsa@uzhnu.edu.ua

³*Wigner Research Centre for Physics, Institute for Solid State Physics and Optics,
1121 Budapest, Hungary*

З часу створення потужних, монохроматичних, когерентних джерел світла пройшов значний час. Вони вже широко використовуються в різних галузях промисловості, геодезії, космонавтиці, медицині і т. д. Особливу популярність джерела стимульованого випромінювання здобули в галузі проведення наукових досліджень, оскільки дали можливість значно спростити методики експериментів та поглибити знання про взаємодію світла з речовинами. Так, якщо раніше при вивчені законів поширення світлових потоків, створюваних тепловими та люмінесцентними джерелами, основну роль відігравали поляризація та частота електромагнітної хвилі, то під час взаємодії потужного лазерного випромінювання з речовою істотною роль уже відіграє інтенсивність світла.

В цих умовах коливання заряджених частинок набуває нелінійного – ангармонічного характеру, що приводить до залежності показника заломлення, діелектричної проникності, поглинальної здатності речовини від інтенсивності світла. Зовсім іншого характеру набувають явища, що характеризують поширення світла в однорідній речовині: порушується принцип суперпозиції, прямолінійність та сталість швидкості поширення світла і т. д.

Слід зазначити, що залежність оптичних явищ від інтенсивності світла була передбачена ще в 1925 році. Проте рівень технічного оснащення тоді був ще низьким, тому їм вдалося зареєструвати нелінійність тільки в дослідах щодо поглинання світла урановими стеклами. За допомогою лазерів нині вже виявлено десятки нелінійних оптичних явищ. Про фізичні основи частини з них, а саме тих, що ефективно виявляються в напівпровідниках, та їх практичне використання, йдеться у оновленому навчальному посібнику [1]. Особлива увага в посібнику звернута на нелінійні властивості халькогенідних склоподібних напівпровідників (XCH), створених на основі халькогенів S, Se і Te з додаванням інших елементів, таких як Ge, As і Sb. Завдяки високій ІЧ-прозорості скла, волокна і тонкі шари на основі XCH, вже використовуються у ІЧ, волоконний, інтегральний та променевій оптиці і військовій техніці.

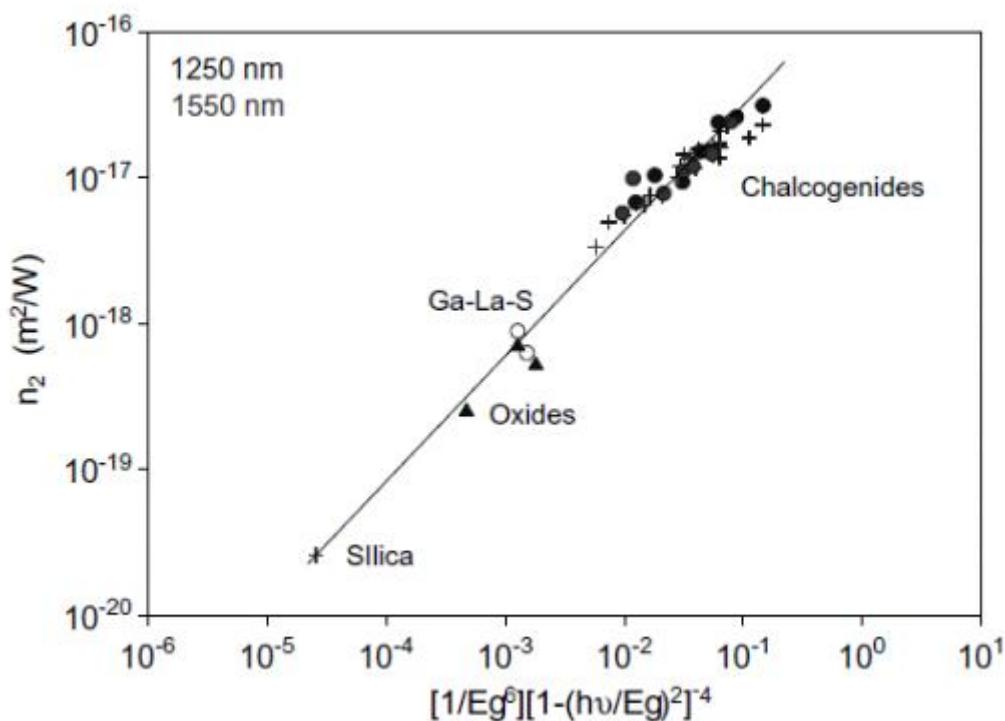


Рис. 0.1. Залежність нелінійного коефіцієнта заломлення n_2 від приведеної ширини заборонної зони оксидних і халькогенідних стекол (J. S. Sanghera, et al., J. Non-Cryst. Solids, 2008, 354:462)

Висока оптична нелінійність халькогенідних оптичних середовищ привела до створення і розвитку нового напрямку - халькогенідної фотоніки, що на даний час вигідно конкурує з відомим вже напрямком кремнієвої фотоніки. Робота над системами надшвидкісної оптичної передачі, обробки і зберігання значних масивів інформації ведеться в ряді розвинутих країн, таких як: США, Японія, Великобританія, Австралія, де були створені потужні центри оптоелектроніки та нанофотоніки (наприклад, у Саумптгемптоні, Сіднеї тощо). Безпека оптичних каналів зв'язку, а також можливість практично «миттевого» розпізнавання образів майбутніми фотонними функціональними елементами також сприятиме обороноздатності та інформаційній безпеці України.

Надшвидкий оптичний зв'язок з використанням голограмічних і нанооптичних елементів на основі ХСН буде одним із найбільш імовірних продуктів для інформаційних технологій і потребує пристройів, у яких нелінійні процеси в оптичних середовищах з миттєвим відкликом на дію нано- та фемтосекундного лазерного збудження і великим динамічним інтервалом відіграють ключову роль для створення надшвидкісних перемикачів і потужних оптичних затворів.

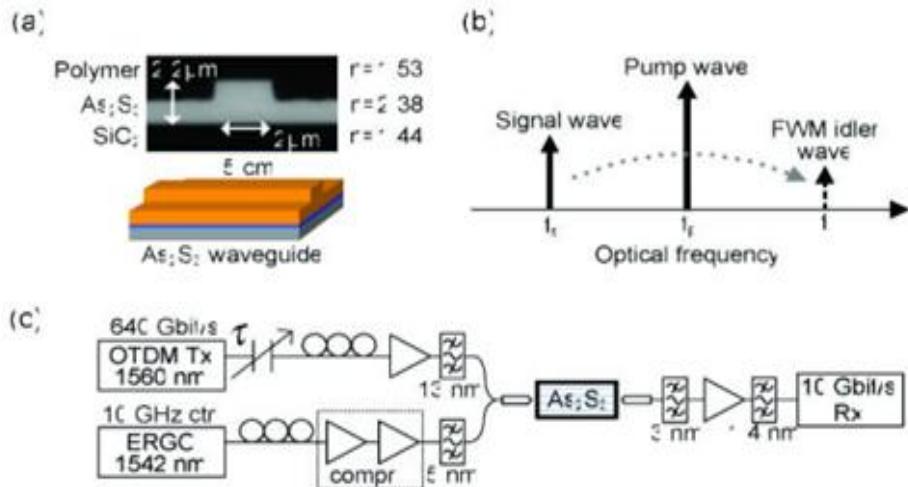


Рис. 0.2. Проривна швидкість перемикання з цілісним оптичним чіпом з халькогенідного скла: 640 Гбіт (Galili, Jing Xu, Hans C.H. Mulvad, Leif K. Oxenløwe, Anders T. Clausen, Palle Jeppesen, Barry Luther-Davies, Steve Madden, Andrei Rode, Duk-Yong Choi, Mark Pelusi, Feng Luan, and Benjamin J. Eggleton. Breakthrough switching speed with an all-optical chalcogenide glass chip: 640 Gbit/s . Optics express . -2009 . -Vol. 17, No. 4. – Рр. 2182-2187)

Нелінійність XCH майже в 1000 разів перевершує нелінійність (коєфіцієнт n_2) силікатних стекол (рис.1.0). В цілому, ефективність використання (figure of merit, FOM) пристрійв на основі нелінійного оптичного поглинання стекол визначається по співвідношенню :

$$FOM = n_2 / (\beta \cdot \lambda), \quad (1.0)$$

де n_2 – дійсна частина нелінійного показника заломлення ; β -коєфіцієнт двофотонних втрат ; λ -довжина хвилі.

На сьогоднішній час в Австралії (університет Сіднея) вже виготовлено дослідні зразки оптичних чіпів з смugoю пропускання 640 Gb/s на основі плівок XCH (c-As₂S₃, рис. 02), що у 8 разів перевищує смугу пропускання в комерційних хвилеводах на основі SiO₂.

Розроблена авторами посібника методика вимірювань коєфіцієнта двофотонних втрат β і порогів лазерного пробою для напівпровідникових матеріалів та результати власних досліджень для XCH (c-As₂S₃ , синтезованих в різних технологічних умовах та стекол системи Ge-As-S вздовж різних розрізів) приведені в посібнику [1].

Посібник рекомендується для студентів та аспірантів факультету інформаційних технологій, що вивчають загальний курс «Фізика», розділ «Оптика» та спеціальні курси по широкосмуговим надшвидкісним методам передачі інформації та студентів фізичних спеціальностей, що вивчають курси «Оптика» та «Нелінійна оптика».

1. Фізичні основи нелінійної оптики напівпровідників. Укладачі : І.Фекешгазі, В.Міца, В.Кут, Р.Голомб, М.Вереш. – Ужгород: УжНУ. 2025. – 104 С.

Nonlinear THz spectroscopy of GaN-based plasmonic crystals

Pavlo¹², Maksym Dub¹², Serhii Kukhtaruk¹³, Martin Mittendorff⁴, Wojciech Knap¹², and Vadym V. Koroteyev¹³

¹*Institute of High Pressure Physics PAS, Warsaw, Poland*

²*CENTERA, CEZAMAT, Warsaw University of Technology, Warsaw, Poland*

³*V. Ye. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics (ISP), NASU, Kyiv, Ukraine*

⁴*Universität Duisburg-Essen, Fakultät für Physik, Duisburg, Germany*

We studied the two-dimensional (2D) plasmon excitations in AlGaN/GaN grating-gate plasmonic crystals (PCs), providing electrical control over 2D electron gas (2DEG) concentration profile under the grating electrode. At low electric field of incoming radiation, we identified the excitation of two distinct PC phases [1]: the delocalized phase at weak modulation of 2DEG density profile, where THz radiation interacts with the entire 2DEG, and the localized phase at strong modulation of 2DEG density profile, achieved by depleting gated regions, at this THz radiation is absorbed only in the ungated portions. Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy revealed an electrically controlled transition between these phases by applying the gate voltage to the grating electrode. Our experimental findings were described in the frame of a theoretical model of PC based on electrodynamic simulation illustrating good agreement with experiment.

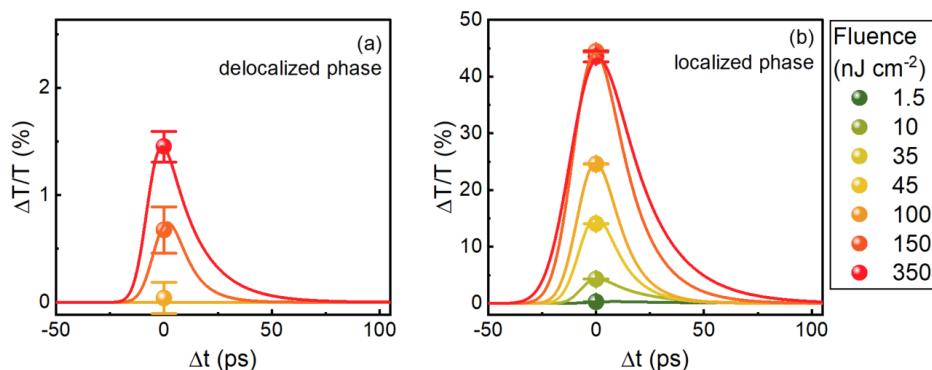


Fig.1. The relative pump-induced changes in transmission, $\Delta T/T$, as a function of time delay Δt measured in nonlinear regime at different pump pulse fluencies varied from 1.5 to 350 $nJ\ cm^{-2}$. THz pumping of delocalized (a) and localized (b) resonances. FEL carrier frequency is 1.84 THz.

Using high-electric-field (up to 5 kV cm^{-1}) THz pump-probe experiment with free electron laser (FEL) as a source of intensive THz pulses, we investigate the nonlinear interaction of spectrally narrow THz pulses with plasmons. FEL carrier frequency 1.84 THz was tuned in resonance with both delocalized and localized modes of plasmons. Nonlinear effects are observed as ultrafast, pump-induced changes in THz transmission (Fig.1), with relative transparency strongly dependent on the localization of plasmonic mode under the excitation. The maximal change of relative transparency, reaching 45 % at 350 nJ cm^{-2} , occurs under resonant excitation of a localized plasmon (Fig.1c) [2]. Transient dynamics reveal fast relaxation times of 15-20 ps. A developed nonlinear model of plasmonic crystal, based on electrodynamic simulations coupled with the viscous hydrodynamic electron transport model, elucidates key nonlinear mechanisms, including near-field localization effects under metallic gratings, electron heating, plasmon resonance broadening, and redshift. These results demonstrate that grating-gate PC has strong nonlinear THz responses, showing potential for ultrafast THz modulation and nonlinear photonics applications.

[1] P. Sai, V. V. Koroteyev, ..., and W. Knap, “Electrical Tuning of Terahertz Plasmonic Crystal Phases”, Phys. Rev. X 13, 041003 (2023).

[2] P. Sai, V. V. Koroteyev, ..., and M. Mittendorff, “Extreme Terahertz Nonlinearity of AlGaN/GaN-based Grating-Gate Plasmonic Crystals”, arXiv preprint arXiv:2503.02562 (2025).

Секція 1.

Нові фізичні явища в об'ємі

та на поверхні напівпровідників

Section 1.

New physical phenomena in volume

and on the semiconductor surface

Спектри поглинання та люмінесцентні властивості стекол системи $\text{Ag}_2\text{S}-\text{GeS}_2-\text{Sb}_2\text{S}_3$ легованих Er^{3+} та Nd^{3+}

В.В. Галян, О.П. Березнюк, Т.К. Мельничук(Яцинюк), Б.М. Світліковський,
В. Артюх, А.Р. Шульгач, О.М. Шевчук

*Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Волі 13, 43000, Луцьк,
Україна, e-mail: halyan.volodimir@vnu.edu.ua*

У сучасній фотоніці та оптоелектроніці активно розвивається напрям створення нових функціональних матеріалів на основі халькогенідних стекол, які демонструють унікальні оптичні властивості в широкому спектральному діапазоні. Вони характеризуються резистивністю до дії агресивних середовищ, високою прозорістю у видимому та інфрачервоному спектральних діапазонах, високим квантовим виходом випромінювання та розчинністю рідкісноземельних металів у склоутворюючій матриці [1, 2].

Особливий інтерес становлять стекла системи $\text{Ag}_2\text{S}-\text{GeS}_2-\text{Sb}_2\text{S}_3$, завдяки поєднанню високої прозорості в ІЧ-області, хімічній стабільності та можливості легування активними іонами рідкісноземельних елементів, такими як Er^{3+} та Nd^{3+} . Ці іони здатні ефективно поглинати та випромінювати світло у вузьких спектральних діапазонах, що є критично важливим для застосування у волоконних підсилювачах, лазерах, сенсорах та інших оптоелектронних пристроях.

Вивчення спектрів поглинання та люмінесцентних властивостей таких стекол дозволяє краще зрозуміти механізми взаємодії іонів з матрицею та відкриває шляхи до оптимізації матеріалів для практичного використання. З огляду на зростаючий попит на нові матеріали для ІЧ-технологій, дослідження стекол системи $\text{Ag}_2\text{S}-\text{GeS}_2-\text{Sb}_2\text{S}_3$, легованих іонами Er^{3+} і Nd^{3+} , є вкрай актуальним як з наукової, так і з прикладної точки зору.

Склоподібні сплави синтезували з елементарних компонентів високого ступеня чистоти: Ag (99,99 мас. %); Ge (ГМО-1); Sb (99,998 мас. %); Er, Nd (99,9 мас. %); S (99,997 мас. %). Синтез проводили у вакуумованих до залишкового тиску $1,33 \cdot 10^{-2}$ Па кварцових контейнерах. Склоподібні сплави нагрівали зі швидкістю 20 К/год до 1100 К із витримками впродовж 24 год за температур 870 К для зв'язування сірки [3]. За максимальної температури зразки витримували 10 год. Після чого ампули зі сплавами гартували у 25-відсотковий водний розчин натрій хлориду з подрібненим льодом.

В діапазоні 600 – 2000 нм досліджено спектри оптичного поглинання (рис. 1) склоподібних сплавів $\text{Ag}_2\text{S}-\text{GeS}_2-\text{Sb}_2\text{S}_3$, легованих Er^{3+} і Nd^{3+} . Зафіксовано вузькі смуги поглинання 655, 755, 810, 885, 980 і 1540 нм, які не змінюють свого положення при збільшенні концентрації рідкісноземельного металу. Максимуми оптичного поглинання відповідають переходам в f-оболонці іонів Er^{3+} та Nd^{3+} .

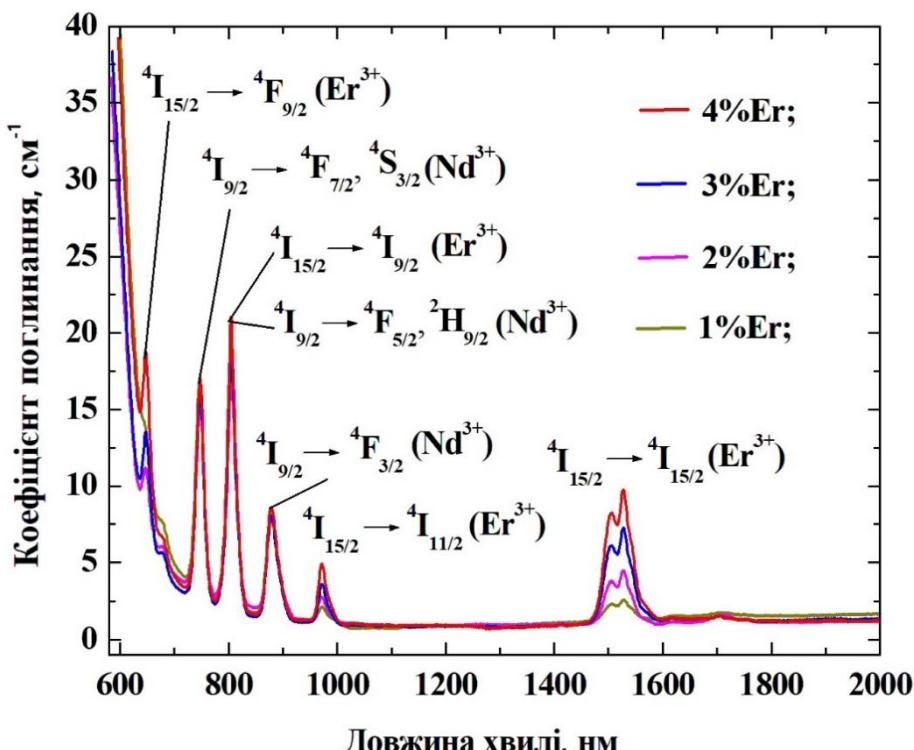


Рис. 1. Спектр поглинання стекол 20 мол. % Ag_2S – 60 мол. % GeS_2 – (17 – 14) мол. % Sb_2S_3 – (1 – 4) мол. % Er_2S_3 – 2 мол. % Nd.

При збудженні лазером із максимальною довжиною хвилі випромінювання 805 нм в стеклах системи $\text{Ag}_2\text{S}-\text{GeS}_2-\text{Sb}_2\text{S}_3$, легованих Er^{3+} і Nd^{3+} зафіксовано фотолюмінесценцію із максимумами 1070 та 1350 нм, які відповідають переходам $^4\text{F}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{11/2}$ та $^4\text{F}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{13/2}$ в іонах Nd^{3+} , відповідно. Обговорюється механізм випромінювання, який побудований на основі діаграми енергетичних рівнів в іонах неодимію.

[1] B. J. Eggleton, B. Luther-Davies, K. Richardson. Chalcogenide photonics. *Nature Photonics*. **5** (2011) 141.

[2]. Heo J., Chung W.J. Rare-earth-doped chalcogenide glass for lasers and amplifiers / J.-C. Adam, X. Zhang [and others]. *Chalcogenide Glasses. Preparation, Properties and Applications*. Cambridge, UK : Woodhead Publishing Limited, 2014. P. 347–378.

[3]. О. Березнюк, , І. Петрусь, О. Смітюх, І. Олексеюк. Сколоутворення в квазіпотрійних системах $\text{A}^{\text{I}}_2\text{S}-\text{B}^{\text{IV}}\text{S}_2-\text{C}^{\text{V}}_2\text{S}_3$ (A^{I} – Cu, Ag; B^{IV} – Ge, Sn, C^{V} – As, Sb). *Проблеми хімії та сталого розвитку*. **4** (2021) 3.

Enlightenment of HgCdTe (MCT) by implantation

F. Sizov, Z. Tsybrii, K. Svezhentsova, M. Vuichyk, A. Yevmenova, O. Gudymenko, O. Kosulya

V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, Nat. Acad. of Sci. of Ukraine
41, Nauky Ave., Kyiv 03028, Ukraine

Mercury-cadmium telluride (MCT) is not a novel material for IR detectors. However, since more than 60 years of been firstly synthesized, due to its physical properties, it remains one of the most promising for short, medium and long wavelength IR cooled quantum IR detectors and arrays with ultimate performance.

The ion implantation is the basic method for making p-n junctions of IR MCT detectors. Regardless to the conductivity type in implanted regions, there are formed n⁺-regions (upper limit $N \approx 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) with the thickness dependent on an ion type and its energy.

This research aimed the investigation of the optical properties of Hg_{1-x}Cd_xTe ($x \approx 0.28$) liquid phase epitaxial (LPE) layers out of the range of the interband transitions. AFM, SIMS and XRD characteristics of LPE p-type layers for 3 to 5 μm region implanted by small radii light ions (Be⁺ and B⁺, atomic #4 and #5, respectively) and intermediate

radii medium mass (Al⁺, atomic #13) and relatively heavy (Ag⁺, atomic #47) ions were studied. The typical for forming n-p-junctions fluencies $N = 3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ and energies $E = 100 \text{ keV}$ were applied. The modeled implantation profiles of B⁺, Be⁺, Al⁺ and Ag⁺ in the MCT semiconductor are shown in Fig.1.

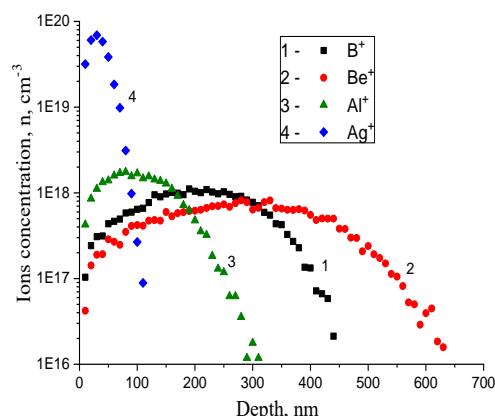


Fig.1. Profiles of implanted B⁺, Be⁺, Al⁺ and Ag⁺ ions concentrations.

If implantation is performed at a low ion-current density, as it is hear, the profiles of the implanted ions are localized near the mean projected range [1] and the profiles of n⁺ electron concentration emerged are close to the profiles of defects generated.

One can see from Fig.1 that the implanted elements distribution depends on the atomic number. E.g., for heavy Ag⁺ ions, they are close to the surface area and ions distributions are decreasing going to the MCT surface. Because of low enthalpy of formation of Hg-Te bond (for Hg-Te $\Delta H_f = -32 \text{ kJ/mol} = -0.33 \text{ eV/bond}$, for Cd-Te $\Delta H_f = -112 \text{ kJ/mol}$) in the process of implantation, part of Hg

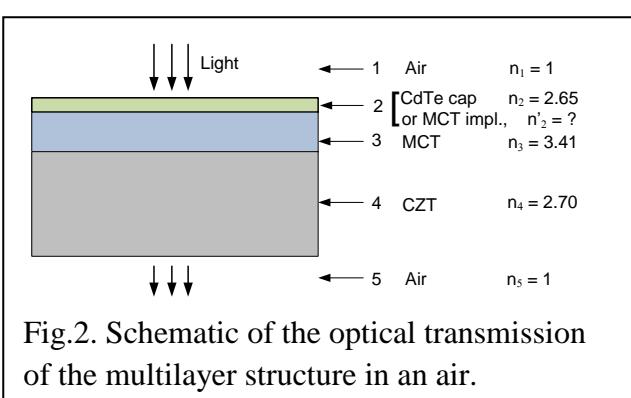


Fig.2. Schematic of the optical transmission of the multilayer structure in an air.

atoms can go out from the surface area [1]. Therefore, part of Hg–Te bonds should be decreased and Cd–Te bonds be increased at the MCT surface decreasing the refractive coefficient ($E_g(\text{CdTe}) > E_g(\text{MCT})$).

To get changes of the refractive index n_2' of implanted MCT layers, the analysis of transparency coefficient through the structure MCT/CdZnTe shown in Fig.2 was considered for the case of absence the interference effects. For such structure, it can be shown, that the transparency coefficient T

$$T = (1 - R_{12}) \times \frac{\exp(-\alpha_2 d_2)}{1 - R_{23}^2 \cdot \exp(-2\alpha_2 d_2)} \times (1 - R_{23}) \times \frac{\exp(-\alpha_3 d_3)}{1 - R_{34}^2 \cdot \exp(-2\alpha_3 d_3)} \times (1 - R_{34}) \times \frac{\exp(-\alpha_4 d_4)}{1 - R_{45}^2 \cdot \exp(-2\alpha_4 d_4)} \times (1 - R_{45}),$$

where α_i , d_i are the absorption coefficients and the thicknesses of the separate layers, respectively, and $R_{ij} = (n_i - n_j)^2 / (n_i + n_j)^2$ are the reflection coefficients at the borders of the layers.

In Fig.3 there are shown the transparency coefficient spectra of implanted at room temperature with Ag^+ ions epitaxial MCT/CZT structures. As one can see from Fig.3, the transparency coefficient T of the implanted with Ag^+ ions LPE MCT increases substantially compared to unimplanted MCT epitaxial layer of MCT/CZT structure that testifies the significant decrease of the refractive index n_2 of the near-surface MCT layer damaged with implanted Ag^+ ions to the depth of about 100 nm (Fig.1). An increase of implanted doses leads to increase of radiation defects but almost does not change the depth of the damaged MCT layers

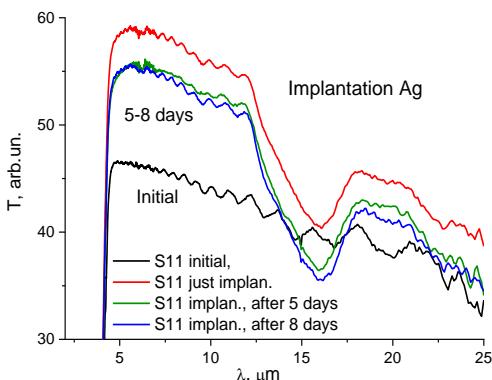


Fig.3. Transparency coefficient of LPE MCT/CZT structure.

temperature with Ag^+ ions epitaxial MCT/CZT structures. As one can see from Fig.3, the transparency coefficient T of the implanted with Ag^+ ions LPE MCT increases substantially compared to unimplanted MCT epitaxial layer of MCT/CZT structure that testifies the significant decrease of the refractive index n_2 of the near-surface MCT layer damaged with implanted Ag^+ ions to the depth of about 100 nm (Fig.1). An increase of implanted doses leads to increase of radiation defects but almost does not change the depth of the damaged MCT layers

[2].

The observed minimum in the transparency spectra of Ag^+ implanted ions at spectral region $\lambda \approx 12 - 17 \mu\text{m}$ seem is connected with deeper extended radiation defects. It is specific for any other implanted ions. All these specific features are observed in implanted with B^+ , Be^+ , Al^+ and Ag^+ ions MCT single crystals though they are less pronounced.

The study of ellipsometric reflection ($\lambda = 632.816 \text{ nm}$) also has shown the substantial changes in refraction coefficient (Table 1) in Ag^+ implanted MCT/CZT structures.

Table 1. Ellipsometric data of refractive “n” and extinction “k” coefficients of unimplanted and implanted by different ions LPE MCT/CZT structures.

MCT/CZT	Un-impl.		Al^+		Ag^+		B^+		Be^+	
	n	k	n	k	n	k	n	k	n	k
$x \approx 0.28$	3.539	0.94	3.44	1.11	3.194	1.28	3.50	1.2	3.497	0.93

1. R. Smith, et.al., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Section B, 215, Is. 1–2, 109 (2004).

2. Bahir G., Kalish R., J. Appl. Phys., 54, 3129 (1983).

Магнетні і діелектричні властивості мультифероїка складу $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$

В.Т.Довгий¹, А.В.Боднарук², О.С.Пилипчук², Р.М.Кравчук², В.Ю.Дмитренко¹,
В.В.Чишко¹

¹Донецький фізико-технічний інститут ім. О. О. Галкіна НАН України, просп. Науки, 46, 03028 Київ, Україна

²Інститут фізики НАН України, просп. Науки, 46, 03028 Київ, Україна

Мультифероїки, матеріали, що показують одночасне існування феромагнетного та сегнетоелектричного впорядкування. Інтерес до цієї тематики обумовлений фундаментальними властивостями мультифероїків і практичними застосуваннями: сенсорна техніка, спінtronіка та інші.

Мета роботи: отримання мультифероїка складу $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$, де іони Bi^{3+} заміщаються іонами Y^{3+} , з поліпшеними магнетними та електричними властивостями при кімнатній температурі і в малих магнетних полях, що важливо для практичних додатків. Склад $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$, залежно від концентрації Y і температури, змінює електричний опір від $\sim \text{гОм}\cdot\text{см}$ до $\sim \text{кОм}\cdot\text{см}$ і має напівпровідниковий тип провідності.

Зразки керамік складів $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$, ($0 \leq x \leq 1$) були отримані золь-гель методом.

Рентгенофазова аналіза здійснювалася на рентгенівському дифрактометрі PROTO AXRD Benchtop. З даних рентгеноструктурного аналізу визначено середній розмір наночастинок порошку методом Шеррера. Встановлено, що зі збільшенням вмісту Y у зразках $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ середній розмір наночастинок порошку зменшується від 83 ± 8 нм ($x=0$) до 33 ± 9 нм ($x=0,1$), 47 ± 10 нм ($x=0,2$), 38 ± 16 нм ($x=0,4$).

Запис петель магнетування проводили на вібраційному магнетометрі LDJ-9500. Криві магнетування кераміки $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ вимірювали в магнетному полі 2,5 кЕ. Аналіз кривих магнетування $M(H)$ дозволяє зробити висновок, що в цій системі в діапазоні концентрацій $0,1 \leq x \leq 0,5$ спостерігається феромагнетне упорядкування. Встановлено, що заміщення ітрієм вісмуту ефективно пригнічує (руйнує) спинову циклоїду і при кімнатній температурі в малому магнетному полі досягається досить велика намагнетованість для мультифероїків, що важливо для практичних додатків.

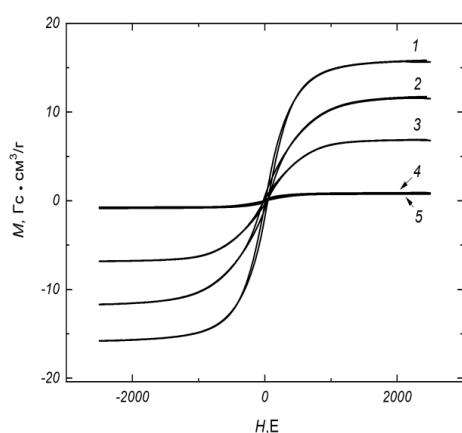


Рис.1. Криві магнетування $M(H)$ для зразків системи $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$, вимірюяні за $T=300\text{K}$ для різних значень x : 1 - 0,5; 2 - 0,3; 3 - 0,2; 4 - 1; 5 - 0,1.

Для проведення електрофізичних та діелектричних вимірювань зразки складу $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ у формі дисків, товщиною 1.5 мм та діаметром 8 мм, покривалися з обох сторін шаром срібла у вакуумній установці ВУП - 5М та були електричними контактами. Діелектричні властивості зразків вимірювалися за кімнатної температури за допомогою RLC-метра UNI-T UT612 . На Рис.2 наведено частотні залежності діелектричної проникності для складу $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ при значеннях $x = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4$. З Рис.2 видно, що діелектрична проникність зразків зменшується зі зростанням частоти та різко зростає в області низьких частот. Найбільш оптимальним, з точки зору величини діелектричної проникності, є склад $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ з $x=0,1$, який має гігантську $\epsilon_r=43,62\times 10^3$ на частоті 100 Гц. На Рис.3 наведена концентраційна залежність діелектричної проникності ϵ_r для складу $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ для значень $0 \leq x \leq 1$ на частотах 1 кГц , 10 кГц і 100 кГц, з якого явно видно, що склад з $x=0,1$ має велику ϵ_r .

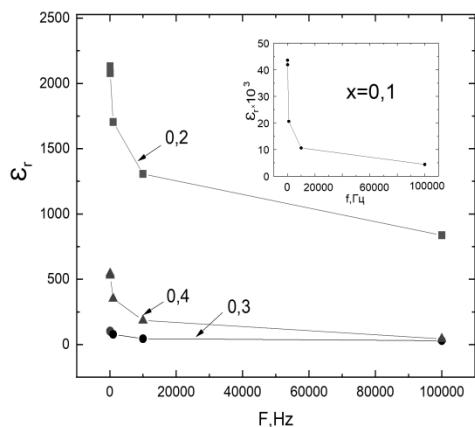


Рис.2. Частотна залежність діелектричної проникності ϵ_r складу $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$, де $x=0,2, 0,3, 0,4$. На вставці $x=0,1$.

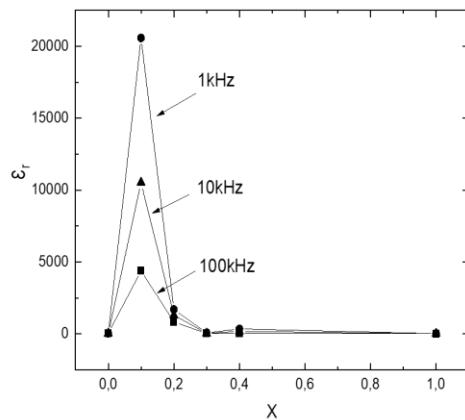


Рис.3. Концентраційна залежність діелектричної проникності ϵ_r складу $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ на частотах 1 кГц, 10 кГц і 100 кГц.

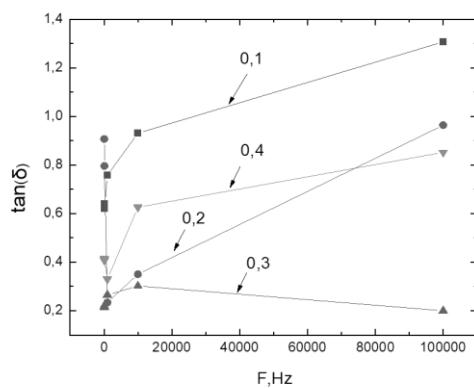


Рис.4. Наведені дані частотної залежності тангенса кута діелектричних втрат $\tan(\delta)$ для складу $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ при концентраціях ітрію $0,1 \leq x \leq 0,4$. Зазначимо, що для більшості складів із зростанням частоти спостерігається деяке збільшення тангенсу кута діелектричних втрат $\tan(\delta)$.

Peculiarities of the influence of annealing temperature on the structural and electrical properties of nanocomposite $\text{SiO}_x(\text{Si})\&\text{Cu}_y\text{O}(\text{Cu})$ films

Bratus O.L.¹, Semeniuk A.S.¹, Kykot A.M.^{1,2}, Sopinsky M.V.¹, Gudymenko O.Yo.¹, Khomenkova L.Yu.¹, Yukhymchuk V.O.¹, Sabov T.M.¹, Oberemok O.S.¹, Kysil D.V.¹ and Evtukh A.A.^{1,2}

¹ V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine 41, Nauky ave., 03028 Kyiv, Ukraine. E-mail: o.l.bratus@gmail.com

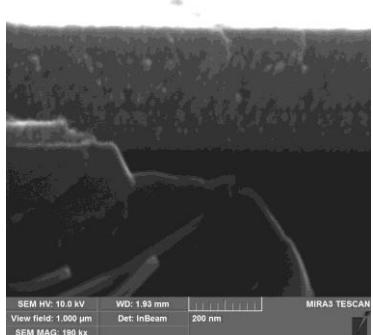
² Educational Scientific Institute of High Technologies Taras Shevchenko National University of Kyiv, 4-g Hlushkova Avenue, Kyiv, Ukraine.

Composite films containing metallic or semiconductor crystallites dispersed in dielectric matrices are of great interest in the scientific community due to their unique physicochemical characteristics. These materials have significant potential for applications in modern technologies, including electronics, optics, sensor systems, and advanced energy devices.

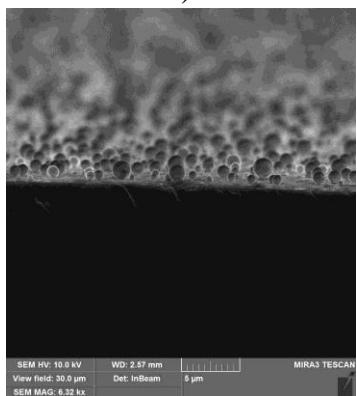
Nanostructured materials based on Cu, particularly nanoparticles, nanowires, and nanotubes, are promising for advanced technological solutions in microelectronics, energy industry, and nanotechnology due to their high surface-to-volume ratio [1, 2]. However, nanoparticles tend to aggregate, which limits their effectiveness. To prevent agglomeration and ensure uniform distribution, encapsulation in silica-based materials is used. This approach not only enhances the stability of the nanoparticles but also expands the scope of their practical applications, making the study of nanocomposite materials even more relevant. The properties of nanocomposite films significantly depend on the fabrication technology and subsequent thermal treatment. This work is largely motivated by the scientific significance and wide application potential of the $\text{SiO}_x(\text{Si})\&\text{Cu}_y\text{O}(\text{Cu})$ system in various fields – from electronics, energy, and catalysis to sensing.

Nanocomposite $\text{SiO}_x(\text{Si})\&\text{Cu}_y\text{O}(\text{Cu})$ films were obtained by ion-plasma sputtering (IPS) method. After that, high-temperature annealing was performed at $T = 400\text{-}1100^\circ\text{C}$ for 30 min in an argon atmosphere.

The results of SEM studies of the nanocomposite $\text{SiO}_x(\text{Si})\&\text{Cu}_y\text{O}(\text{Cu})$ film are presented in Fig.1: (a) initial; (b) annealed at $T = 1000^\circ\text{C}$. Annealing causes a structural transformation of the original film, which leads to the formation of a granular texture, pores, and the formation of well-defined spheres on the surface.



a)



b)

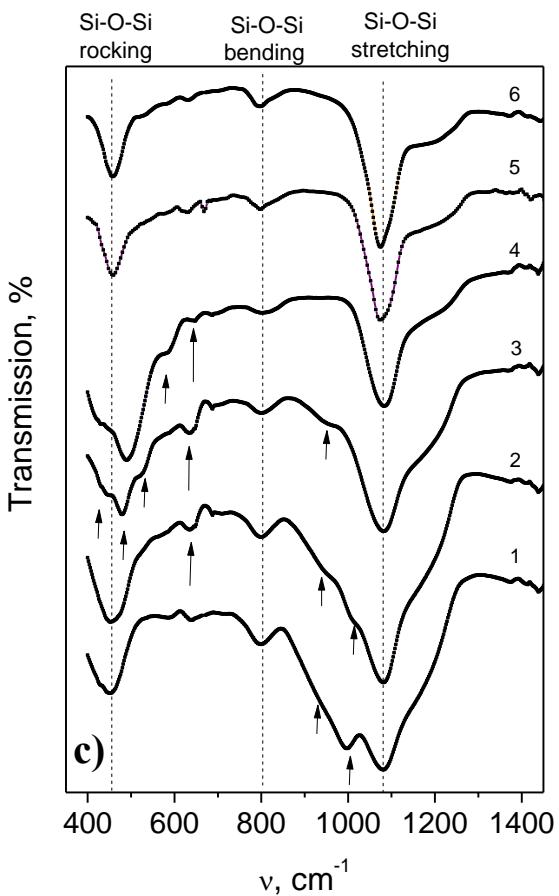


Fig. 1. SEM images of nanocomposite $\text{SiO}_x(\text{Si})\&\text{Cu}_y\text{O}(\text{Cu})$ film: (a) initial; (b) annealed at $T = 1000$ °C; (c) IR transmission spectra before (curve 1) and after annealing at temperatures 400 °C (curve 2), 600 °C (curve 3), 800 °C (curve 4), 1000 °C (curve 5) and 1100 °C (curve 6).

The evolution of the $\text{SiO}_x(\text{Si})\&\text{Cu}_y\text{O}(\text{Cu})$ film structure after annealing was investigated by FTIR (see Fig. 1c). High-temperature annealing leads to the quenching of Cu–O vibrations, which may indicate the formation of oxygen-free copper compounds. This suggests the possible formation of copper clusters embedded in the silicon oxide matrix, or the appearance of additional oxygen-free copper phases. Analysis of the current-voltage characteristics in the range of $T = 80\text{--}350$ K showed a significant effect of the annealing temperature on the electron transport mechanisms in nanocomposite $\text{SiO}_x(\text{Si})\&\text{Cu}_y\text{O}(\text{Cu})$ films.

- [1] Molahalli, V., et al. *Copper-Based Nanomaterials in Organic Transformations*. ACS, 2024, pp. 1–33.
<https://doi.org/10.1021/bk-2024-1466.ch001>.
- [2] Maity, A., et al. *ACS Omega*, **5** (21), 2020, 12421–12430.
<https://doi.org/10.1021/acsomega.0c01186>.

Електричні властивості опроміненого електронами n-Ge

С.В. Луньов¹, М.В. Хвищун¹, Д.А. Захарчук¹, В.Т. Маслюк²

¹Луцький національний технічний університет,

вул. Львівська 75, м. Луцьк, 43018, Україна

²Інститут електронної фізики НАН України,

вул. Університетська 21, м. Ужгород, 88017, Україна

Найбільш уразливими елементами електронної апаратури космічних апаратів, атомних електростанцій, підводних та надводних кораблів з ядерними реакторами, ракетних комплексів стратегічного призначення до впливу проникаючої радіації є елементи, які виготовлені з напівпровідниківих матеріалів. Тому основною задачею науковців та інженерів є забезпечення надійного та тривалого функціонування таких елементів та, відповідно, електроніки в цілому в умовах підвищеного радіаційного фону. Вирішення такої задачі вимагає, в першу чергу, проведення фундаментальних досліджень впливу опромінення на електричні властивості напівпровідників. Германій та кремній на сьогодні є базовими матеріалами мікро- та наноелектроніки. За даними багатьох сучасних наукових робіт можна стверджувати, що германій навіть «витіснив» кремній, оскільки він має більшу рухливість носіїв струму і створені на основі нього, наприклад, МОН-транзистори матимуть більшу швидкодію. Тому актуальним з точки зору дослідження радіаційної стійкості германію та приладів, виготовлених на його основі, є вивчення впливу іонізуючого випромінювання на електричні властивості даного матеріалу.

В наших дослідженнях використовувались монокристали германію, які були вирощенні за методом Чохральського та в процесі вирощування легувались домішкою Sb, концентрацією $1,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Одержані зразки германію для досліджень електропровідності та ефекту Холла опромінювались на мікротроні M-30 різними потоками електронів з енергією 19 MeV. Як відомо, енергія зміщення E_T атома германію знаходиться в діапазоні 5-20 eV. Оскільки енергія прискорених електронів $E >> E_T$, то таке опромінення призводить до утворення як масиву первинних радіаційних дефектів, так і каскадів зміщень атомів внаслідок віддачі енергії точкових дефектів. Така картина є типовою для опромінення речовини швидкими нейtronами, тобто електрони таких енергій моделюють радіаційні пошкодження речовини, що спричиняє опромінювання її нейtronами. З аналізу одержаних результатів слідує, що концентрація носіїв струму в германії зменшувалася зі збільшенням потоку опромінення. Це пояснюється тим, що утворені радіаційні дефекти є акцепторами по відношенню до легуючої донорної домішки Sb. Тому зростання концентрації радіаційних дефектів зі збільшенням потоку опромінення призвело до того, що для потоків $\Phi \geq 1,3 \cdot 10^{14} \text{ ел./см}^2$

відбулася п-р - конверсія типу провідності германію. Також радіаційні дефекти є активними центрами розсіяння носіїв струму, що є причиною зменшення рухливості носіїв струму. Проте, залежність рухливості носіїв струму від величини потоку опромінення виявилась зовсім не типово. При збільшенні потоку опромінення до $5 \cdot 10^{13}$ ел./ см^2 рухливість спочатку зменшувалась і, досягнувши свого мінімуму, зростала. Таке аномальне зростання рухливості носіїв струму раніше було також виявлено в n-Si, опроміненому протонами [1, 2]. Даний ефект пояснюється утворенням при опроміненні в об'ємі кремнію, крім точкових дефектів, високопровідних (металоподібних) включень з високою рухливістю носіїв струму (значно більшою, ніж в матриці), а також зміною ступеня екранування цих включень оболонками з точкових дефектів при варіації потоку опромінення і температури вимірювань. Аналогічне зростання рухливості електронів було одержано нами в роботі [3] для монокристалів n-Ge, опромінених електронами з енергією 10 MeВ та потоком $\Phi = 5 \cdot 10^{16}$ ел./ см^2 . Тому у випадку опромінення монокристалів n-Ge потоками $\Phi \geq 5 \cdot 10^{13}$ ел./ см^2 електронів величина рухливості носіїв струму буде залежати від концентрації утворених точкових дефектів та включень, розміру цих включень та характеру їх екранювання точковими дефектами. При потоках $\Phi < 5 \cdot 10^{13}$ ел./ см^2 основний вклад у величину рухливості носіїв струму вносить розсіяння електронів на точкових дефектах, зростання концентрації яких і призводить до зменшення рухливості електронів зі збільшенням потоку опромінення. Ефект зростання рухливості в опромінених монокристалах германію може бути використаним в CMOS технологіях створення електронних пристрій. При цьому такі пристрой, які пройшли попередню стадію радіаційної обробки такими потоками електронів, матимуть підвищений радіаційних захист.

1. Hall-effect study of disordered regions in proton-irradiated n-Si crystals / T. A. Pagava, M. G. Beridze, N. I. Maisuradze, L. S. Chkhartishvili, I. G. Kalandadze. *Ukrainian journal of physics*. 2013. Vol. 58. P. 773-773.
2. 18 MeV Proton Irradiation Effects on Electro-Physical Parameters of Silicon Crystals / V. V. Arzumanyan. *Armenian Journal of Physics*. 2022. Vol. 15. p. 7-12.
3. The impact of electron irradiation on the electrical properties of n-Ge single crystals / S. V. Luniov, A. I. Zimych, P. F. Nazarchuk, V. T. Maslyuk, O. V. Burban. *SCIREA Journal of Physics*. 2019. Vol.4, p. 1-7.

Дослідження фотостимульованої дифузії срібла в тонкопліковій структурі Ag–As₂S₃ методом реєстрації поверхневих плазмон-поляритонів

Індутний І.З., Минько В.І., Сопінський М.В., Мамикін С.В.

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, проспект

Науки, 45, 03028 Київ, Україна. E-mail: indutnyy@isp.kiev.ua

Дифузія срібла в тонкі шари халькогенідного скла (ХС) стимульована світлом, електронними та іонними потоками, досліджується вже понад 50 років [1]. Останнім часом дослідники зацікавились структурами Ag-ХС на основі тонких (товщиною в десятки нанометрів) шарів халькогенідів [2, 3]. Такі структури є перспективними для радіаційно стійких енергонезалежних запам'ятовуючих пристройів, які користуються великим попитом, зокрема в космічній галузі. Проте через малі товщини таких шарів і чутливість структур Ag-ХС до опромінення дослідження фотостимульованих процесів у них із використанням традиційних методик є складним завданням.

Нешодавно нами було застосовано метод, що використовується в оптичних сенсорах на основі поверхневих плазмон-поляритонів (ППП), для дослідження структур Ag-ХС із товщиною шару халькогеніду 10–20 нм. Було показано, що для таких зразків метод контролю фотостимульованих змін шляхом реєстрації ППП є більш чутливим, ніж традиційний фотометричний [4].

У цій доповіді методом реєстрації ППП досліджено особливості фотостимульованої дифузії срібла в тонкошаровій структурі Ag–As₂S₃ під час опромінення світлом різних довжин хвиль (405, 532 і 632,8 нм). Як підкладку використовували срібну дифракційну решітку з періодом 515 нм і глибиною рельєфу 20 нм; таке співвідношення параметрів решітки є близьким до оптимального значення для найефективнішого збудження ППП. Кінетику фотостимульованих змін у досліджуваній структурі реєстрували шляхом аналізу зміни форми та положення ППП резонансу у кутовій залежності дзеркального відбиття р-поляризованого низькоінтенсивного випромінювання Не-Не-лазера.

Виявлено відмінності в оптичних властивостях тонких фотолегованих шарів As₂S₃ під дією світла з ділянок спектра, що відповідають міжзонним переходам, а також переходам із залученням локалізованих станів у межах забороненої зони As₂S₃. Показано, що ці відмінності пов'язані з особливостями механізму фотолегування за даних умов експонування. Зокрема, експонування зразків «решітка Ag – шар As₂S₃» випромінюванням 405 нм (міжзонні переходи) призводить до значного поглинання в As₂S₃, інтенсивної генерації електронно-діркових пар, розриву халькогенідних ковалентних зв'язків, сильного дрейфового потоку іонів Ag⁺ та утворення зв'язків Ag-S і кластерів Ag₂S, що

збільшує обидві ефективні оптичні константи (показники заломлення та поглинання) халькогенідного шару. При цьому спостерігається значний зсув положення мінімуму ППП резонансу і відносно невелике зменшення його глибини.

При експонуванні довгохвильовим випромінюванням (632,8 нм, 532 нм) основний внесок у електронну стадію процесу фотолегування спричиняє внутрішня фотоемісія електронів із шару Ag до шару ХС. Оскільки поглинання в довгохвильовій області слабке (як і інтенсивність фотоемісії), швидкість фотолегування значно нижча, ніж при експонуванні випромінюванням із області міжзонних переходів. Крім того, фотоемісія виникає в окремих місцях на поверхні шару Ag (наприклад, на межах зерен плівки срібла). Отже, фронт дифузії Ag демонструє значну нерівномірність по поверхні зразка, що призводить до вираженої шорсткості межі розділу Ag-As₂S₃ і швидкого зменшення глибини плазмонного резонансу (δR_p^{\min}) через збільшення розсіювання ППП на цій межі. Водночас відносна зміна кутового положення резонансу ($\delta\theta_r$), яка визначається зміною показника заломлення шару ХС, залишається порівняно невеликою. Тобто при однаковому δR_p^{\min} для обох способів експонування, $\delta\theta_r$ буде на порядок більше при експонуванні короткохвильовим випромінюванням із області міжзонних переходів As₂S₃, що і спостерігається в експерименті.

- [1] M.T. Kostyshin, E.V. Michailovskaya, P.F. Romanenko, On the effect of photographic sensitivity of the thin semiconductor layers deposited on metal substrates, Sov. Phys. Solid State 8 (1966) 451–452.
- [2] H. Park, T. Watanabe, I. Yoda, Y. Shohmitsu, S. Kawasaki, T. Nakaoka, 2020. Reversible and irreversible resistance changes for gamma-ray irradiation in silver-diffused germanium telluride. SN Applied Sciences. 2, 2111. <https://doi.org/10.1007/s42452-020-03927-0>.
- [3] P. Priyadarshini, S.Das, R. Naik, A review on metal-doped chalcogenide films and their effect on various optoelectronic properties for different applications, RSC Adv. 12 (2022) 9599–9620. <https://doi.org/10.1039/d2ra00771a>. <https://doi.org/>
- [4] I. Indutnyi, V. Mynko, M. Sopinskyy, P. Lytvyn, Impact of surface plasmon polaritons on silver photodiffusion into As₂S₃ film, Plasmonics 16 (2021) 181–188. <https://doi.org/10.1007/s11468-020-01275-8>.

Надшвидке двофотонне оптичне стробування у кремнієвому CMOS-сенсорі для візуалізації крізь розсіювальне середовище

В. М. Кадан, А. М. Дмитрук, І. О. Павлов, І. М. Дмитрук

Україна, 03028 м. Київ, проспект Науки 46, Інститут фізики НАН України

Різноманітні стробоскопічні схеми нелінійно-оптичних затворів вирішують проблему повільного часу відгуку оптичних сенсорів. Вдосконалення цих методів актуальне для таких застосувань, як спостереження об'єктів крізь розсіювальні середовища, візуалізація тривалості флуоресценції, часороздільна спектроскопія.

У межах цього дослідження продемонстровано можливість реалізації швидкісного нелінійно-оптичного затвора (гейта) шляхом невиродженої двофотонної фотогенерації вільних носіїв безпосередньо в багатопіксельному кремнієвому CMOS-сенсорі. Енергетична схема, яка ілюструє процес нерезонансного двофотонного збудження у кремнії фотонами сигналу $\hbar\omega_s$ і гейту $\hbar\omega_g$, наведена на вставці до рис. 1. Через непряму заборонену зону необхідною є участь фонона. Сигнальний промінь, енергія фотона якого $\hbar\omega_s$ має бути меншою за ширину забороненої зони кремнію $E_g = 1.12$ еВ (1107 нм), не здатен самостійно збуджувати електрони в зону провідності. Analogічно, стробувальний гейт-імпульс має вищу пікову інтенсивність, але його енергія фотона $\hbar\omega_g$ повинна бути меншою за половину E_g (тобто $2\hbar\omega_g < E_g$), для того, щоб не викликати одно- чи двофотонну фотогенерацію при окремому застосуванні. Однак, за умови просторово-часового перекриття імпульсів, коли їх сумарна енергія задовольняє умову $(\hbar\omega_s + \hbar\omega_g) \geq E_g$, виникає двофотонна фотогенерація вільних носіїв, що дає змогу короткому гейт-імпульсу стробувати сигнальний. Відокремлюючи нерозсіяні балістичні фотони, які прибувають на детектор першими, від масиву розсіяних дифузних фотонів, затвор робить можливим спостереження об'єкту крізь розсіювальне середовище.

Можливість використання кремнієвого CMOS-сенсора для двофотонної балістичної візуалізації підтверджено в експерименті, принципова схема якого наведена на рис. 1. В якості об'єкту використовувалася чорно-біла гратка з просторовим періодом 175 мкм, надрукована на прозорій плівці. Сильно розсіювальну суспензію наночастинок Al_2O_3 у гліцерині з оптичною густинорою 3 (пропускання: 10^{-3}) розмістили між об'єктом і камерою. Пара імпульсів сигнал-гейт тривалістю 150 фс та частотою повторення 1 кГц ($\lambda_s = 1300$ нм, $\lambda_g = 2300$ нм) використовувалася при середній потужності гейту $P_g = 10$ мВт. Зображення об'єкта (сигнал) в геометрії на пропускання проектувалося на CMOS-сенсор. Стробувальний пучок із контролюваною часовою затримкою безпосередньо освітлював сенсор. Двофотонна

фотогенерація і реєстрація зображення відбувалося за умови часового і просторового збігу світлових імпульсів сигналу і стробу.

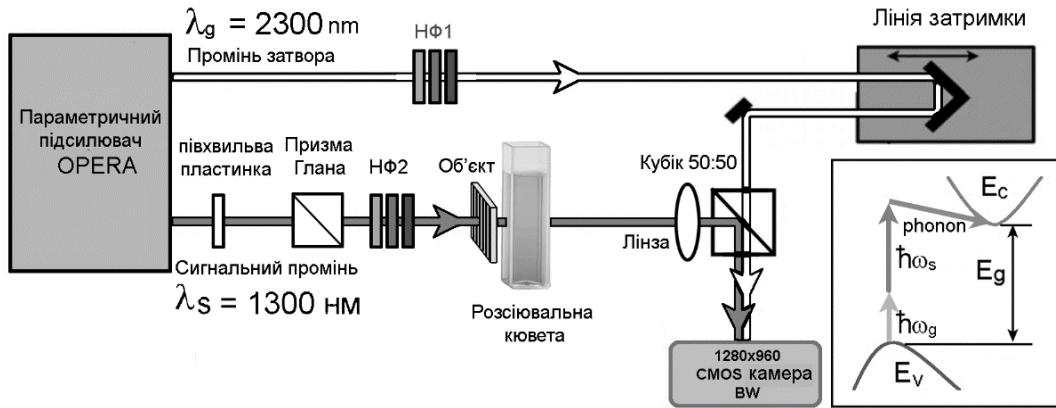


Рис. 1. Експериментальна установка

На рис. 2(а) показано зображення зразка, отримане крізь розсіюване середовище у видимому світлі. Зображення з часовим розділенням (рис. 2(б-г)) ілюструють балістичну фотонну візуалізацію, де максимальний контраст, який значно перевищує контраст однофотонної візуалізації (рис. 2(а)), спостерігається при нульовій часовій затримці між сигнальним імпульсом і стробом. При затримках ± 300 фс зображення практично не реєструється.

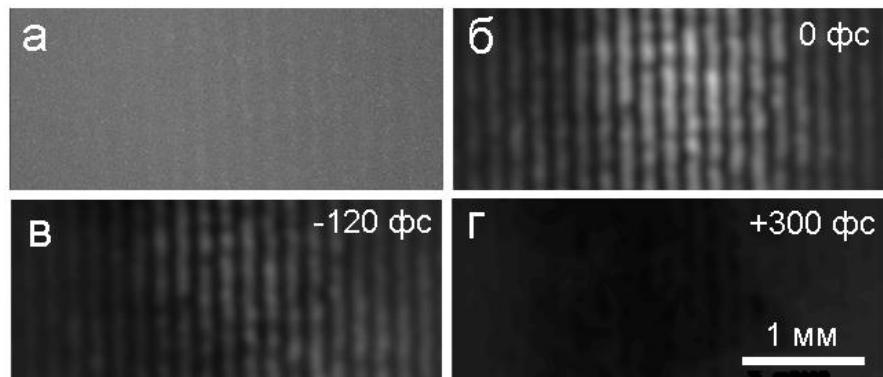


Рис. 2. Зображення об'єкта крізь розсіюване середовище, отримане у видимому світлі (а) і двофотонні зображення (б-г). Часові затримки між імпульсами сигналу і гейту вказані на зображеннях

Наскільки нам відомо, це є першою експериментальною демонстрацією можливості використання невиродженого двофотонного поглинання в багатопіксельному CMOS сенсорі для безсканувальної балістичної візуалізації крізь розсіюване середовище. У дослідженні встановлено енергетичні умови для фотонів, спектральний діапазон і часову роздільність методу.

Вплив розподілу атомів Mg і Ti на фізичні властивості кубічного Mg_2TiO_4

Н.І. Каширіна¹, Л.В. Борковська¹, Я.О. Каширіна², О.С. Муратов³, О.С. Роїк³

¹Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України.

Проспект науки, 41, 03028 Київ, Україна. e-mail: kashirina1506@gmail.com

² Інститут проблем матеріалознавства ім. Францевича НАН України.

Бул. Омеляна Пріцака 3, 03142 Київ, Україна.

³Київський національний університет ім. Тараса Шевченка.

Хімічний факультет. Кафедра фізичної хімії.

Бул. Гетьмана Павла Скоропадського, 12, 01033 Київ, Україна

Кераміка на основі Mg_2TiO_4 (МТО) широко застосовується для виготовлення резонаторів, фільтрів, антен, світлодіодів, необхідних у сучасних приладах квантової електроніки. В роботі дослідженні фізичні характеристики кубічної модифікації Mg_2TiO_4 (МТО) зі структурою оберненої шпінелі з використанням програмного комплексу Vienna Ab initio Simulation Package (VASP).

Для розрахунку властивостей кристала була обрана елементарна комірка МТО з 56 атомів з певними позиціями окремих атомів. Як вільна енергія кристала, так і інші фізичні характеристики, такі як ширина забороненої зони, густина розподілу електронних станів, зонна структура залежать від позицій атомів в кристалічній гратці. Атоми магнію і титану, що займають октаедричні позиції (ОП) в елементарній комірці розподілені випадковим чином. Перенумеруємо координати 16 октаедричних позицій, за якими можуть бути розміщені атоми магнію і титану у форматі N(x,y,z), де N – номер відповідної позиції (N=1,2...16): 1(0.375, 0.375, 0.375); 2(0.375, 0.875, 0.875); 3(0.875, 0.375, 0.875); 4(0.875, 0.875, 0.375); 5(0.125, 0.875, 0.625); 6(0.125, 0.375, 0.125); 7(0.625, 0.875, 0.125); 8(0.625, 0.375, 0.625); 9(0.875, 0.125, 0.625); 10(0.875, 0.625, 0.125); 10(0.875, 0.625, 0.125), 11(0.375, 0.125, 0.125), 12(0.375, 0.625, 0.625); 13(0.125, 0.625, 0.875); 14(0.125, 0.125, 0.375); 15(0.625, 0.625, 0.375); 16(0.625, 0.125, 0.875).

Таблиця 1. Вільна енергія E (eВ) та ширина забороненої зони ΔE (eВ) для різних розподілів атомів Ti та Mg за октаедричними позиціями Mg_2TiO_4 (VASP, функціонал HSE). * – розрахунок у програмі Quantum Espresso з гібридним функціоналом GAUPBE [1]

n	ОП, зайняті Ti	Симетрія	E	ΔE
1	1, 4, 5, 7, 9, 10, 13, 16	C 2/m	-489.197	4.06 4.3*
2	1, 5, 7, 8, 11, 13, 14, 15	P 1	-489.371	4.086 4.01*
3	2, 3, 5, 8, 10, 11, 14, 15	P 41 2 2	-490.5882	4.967 5.032*

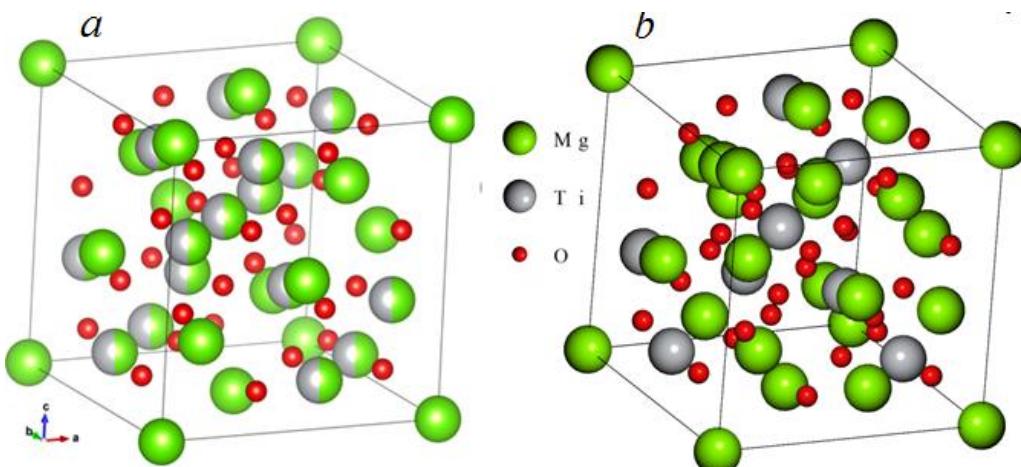


Рисунок 1. Елементарна комірка кубічного Mg_2TiO_4 : *a*) атоми Mg та Ti з рівною ймовірністю розподілені по октаедричним позиціям (сіро-зелені сфери); *b*) атоми Mg і Ti розподілені по октаедричним позиціям випадковим чином (конфігурація $n=2$ в Табл. 1)

На Рис1. Показано структуру елементарної комірки МТО (56 атомів), з яких 16 (8 атомів Ti і 8 атомів Mg) випадковим чином займають позиції з октаедричним оточенням атомами кисню. Процедура знаходження різних варіантів розподілу атомів Mg і Ti за октаедричними позиціями може бути охарактеризована як генерація комбінацій 8 елементів списку за 16 позиціями без повторень. Використаний алгоритм знаходження різноманітних конфігурацій входить у стандартну бібліотеку мови Python3. У Таблиці 1 наведено результати розрахунків, виконаних для 3 конфігурацій з найнижчими енергіями, отриманими нами з використанням програмного комплексу VASP з гібридним функціоналом Гайда–Скузерії–Ернцергофа (HSE). Метод узагальненої градієнтної апроксимації (GGA) з обмінно-кореляційним потенціалом Пердью–Ванга (PW91), який використовувався в роботі [2] для конфігурації $n = 1$ призводить до суттєво занижених значень ширини забороненої зони $\Delta E = 2.4$ еВ. Розрахунки з функціоналом HSE дають задовільне узгодження з експериментом як для кубічного, так і для тетрагонального ($n = 3$ в Табл. 1) Mg_2TiO_4 . Експериментальні значення ширини забороненої зони МТО варіюються в межах від 3.7 еВ [3] до 4.33 еВ [4].

1. J.-W. Song, K. Yamashita and K. Hirao // *J. Chem. Phys.* – 2011. –V. **135**. –P. 07110. DOI: 10.1063/1.3628522
2. C.-S Huang, et al // *J. Electron. Mater.* – 2016. –V.**45**. –P. 6214–6221. Doi:10.1007/s11664-016-4846-1
3. Y.-D. Ho, et al // *J. Am. Ceram. Soc.* -2014. –V **97**, –P. 358-360. DOI:10.1111/jace.12775
4. L. Borkovska, et al // *Journal of Materials Science: Materials in Electronics.* – 2018. – V. **29**. – P. 15613-15620. DOI:10.1007/s10854-018-9153-6

Перспективні матеріали для нанооптики та комп'ютерної техніки на основі халькогенідів As_2S_3 , легованих Mn

Кондрат О.Б.,¹ Міца О.В.,¹ Голомб Р.М.,^{1,2} Чік А.,³ Токач В.,³ Кондрат О.О.,¹ Міца В.М.,¹ Вереш М.,² Паюк О.П.,⁴ Сtronський О.В.⁴

¹Ужгородський національний університет, 88000, Україна, Закарпатська обл., м. Ужгород, пл. Народна, 3

E-mail: oleksandr.kondrat@uzhnu.edu.ua

²Institute for Solid State Physics and Optics, HUN-REN Wigner Research Centre for Physics, 1121 Budapest, Hungary

³Institute for Nuclear Research, Hungarian Academy of Sciences, H-4001 Debrecen, Hungary

⁴Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України, 03028, Україна, Київ, просп. Науки, 41

Метою роботи було дослідження впливу легування марганцем на структуру та властивості тонких плівок As_2S_3 . Рентгенівська фотоелектронна спектроскопія є чутливим методом для вивчення локальної структури матеріалів, зокрема для визначення типу і кількісного аналізу структурних одиниць, з яких складається досліджуваний матеріал. Було проведено структурний аналіз плівок As_2S_3 з вмістом марганцю 5 ат. %. Для порівняння також досліджено структуру нелегованих плівок As_2S_3 , виготовлених у тому ж технологічному циклі, за аналогічних умов експерименту. Для синтезу плівок підкладки з кремнію (Si) розміщували під потоком і витримували при температурі приблизно 100 °C у трубчастій печі, крізь яку пропускали пари As_2S_3 . Пари отримували шляхом сублімації порошку скла As_2S_3 при температурі приблизно 300 °C, і спрямовували вниз за допомогою транспортного газу H_2/As . Фотоемісійні спектри отримували з використанням рентгенівського джерела Al K- α ($h\nu = 1486$ eV). Спектри основних енергетичних рівнів As 3d, S 2p та Mn 2p вимірювали в геометрії нормальної емісії. Для компонентного аналізу спектрів використовувалася програма CASA XPS. Додатково також були виміряні спектри основних рівнів C 1s та O 1s. Енергетичне положення всіх піків було скориговано за положенням графітового піку (на 284.5 eV). Спектр C 1s апроксимували з використанням компонентів C–C та C–O. Останній компонент відповідає компоненту O–C в спектрі O 1s.

Із результатів дослідження випливає, що спектр основного рівня S 2p плівки As_2S_3 може бути розкладений на дві компоненти. Енергетичне положення компоненти 1 (та її спін-орбітального розщеплення 1') дозволяє ідентифікувати її як структурну одиницю (с.о.) S–As₂. Ця компонента є характерною с.о. для кристалічного As_2S_3 . Компоненти 2 (та 2') можна класифікувати як сіркоzbагачені с.о. типу S–S–As. У спектрі основного рівня S 2p плівки As_2S_3 :Mn (5 ат. %) виявлено третю компоненту при енергії зв'язку 160.9 eV, що свідчить про

утворення зв'язків S–Mn у структурі плівки. Їх присутність також підтверджується результатами дослідження спектру основного рівня Mn 2р. Відповідний спектр плівки As₂S₃:Mn (5 ат. %) описується однією компонентою з енергією зв'язку 640.4 еВ (2p_{3/2}). Це свідчить про те, що всі атоми Mn беруть участь у зв'язках Mn–S, що також призводить до відокремлення As-збагачених с.о. у структурі цієї плівки. Це припущення додатково підтверджується результатами Раман-спектроскопії. Основні рівні As 3d у плівках As₂S₃:Mn (Mn = 0% та 5 ат.%) розділено на дві компоненти: As–S₃ (1, 1') та As–S₂As (2, 2'). Таке розділення базується на наших попередніх дослідженнях і добре узгоджується з опублікованими даними [1,2]. Це також корелює з присутністю гомополярних зв'язків S–S у спектрі S 2p. Крім того, наявність замкнутих молекул As₄S₄ з гомополярними As–As зв'язками підтверджується результатами дослідження структури стекол As₂S₃:Mn методом Раман-спектроскопії.

Було також отримано спектри валентної зони плівок As₂S₃ та As₂S₃:Mn 5 ат.%. Встановлено, що пік у діапазоні ~4–7 еВ формується в результаті змішування станів As 4d та S 3p. Було проаналізовано різницевий спектр і виявлено, що наявність Mn у плівці As₂S₃ призводить до значного збільшення густини станів у верхній частині валентної зони. Це, у свою чергу, може зумовити зменшення ширини забороненої зони модифікованої плівки порівняно з забороненою зоною нелегованої плівки As₂S₃. Таким чином, подібна технологічна модифікація призводить до підвищення світлочутливості за рахунок утворення додаткових молекул As₄S₄ у структурній сітці, а також завдяки зменшенню оптичної забороненої зони отриманої структури. Збільшена чутливість модифікованої плівки до лазерного опромінення робить її придатною для голографічного запису інформації, лазерної функціоналізації поверхні, прямого запису оптичних хвилеводів, світлоіндукоюваної постобрюбки та оптичного наноформування.

1. O.B. Kondrat, R.M. Holomb, A. Csik, V. Takats, M. Veres, A. Feher, T. Duchon, K. Veltruska, M Vondráček, N. Tsud, V. Matolin, K.C. Prince and V.M. Mitsa. Reversible structural changes of *in situ* prepared As₄₀Se₆₀ nanolayers studied by XPS spectroscopy. *Appl. Nanosci.* (2018). <https://doi.org/10.1007/s13204-018-0771-3>.

2. R. Holomb, O. Kondrat, V. Mitsa, A. Mitsa, D. Gevczy, D. Olashyn, L. Himics, I. Rigó, A. J. Sadeq, M. H. Mahmood, T. Váczi, A. Czitrovszky, A. Csík, V. Takáts, M. Veres. Gold nanoparticle assisted synthesis and characterization of As-S crystallites: scanning electron microscopy, X-ray diffraction, energy-dispersive X-ray and Raman spectroscopy combined with DFT calculations. *Journal of Alloys and Compounds*. Volume 894, 15 February 2022, 162467.

Effect of modification of nonwoven textiles with biochar and multi-walled carbon nanotubes on their dielectric properties

T.M. Kovalchuk¹, O.V. Kovalchuk^{2,3}, K. Zolochevska⁴, P. Kopčanský⁴, J. Prochazkova⁵, I. Safarik^{4,5,6}

¹V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

²Kyiv National University of Technologies and Design, Kyiv, Ukraine

³Institute of Physics, NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

⁴Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences, Kosice, Slovakia

⁵Department of Nanobiotechnology, ISBB, Biology Centre, Czech Academy of Sciences, Ceske Budejovice, Czech Republic

⁶Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Czech Advanced Technology and Research Institute, Olomouc, Czech Republic

*Corresponding author e-mail: tatnik1412@gmail.com, akoval@knutd.com.ua

One of the main methods of textile studies is dielectric spectroscopy [1, 2], since the vast majority of textiles are dielectrics rather than conductors. Dielectric properties of native nonwoven textile as well as textile with bound biochar and multi-walled carbon nanotubes within the frequency range of 10 to $5 \cdot 10^5$ Hz and at the temperatures of 30 to 60 °C have been investigated.

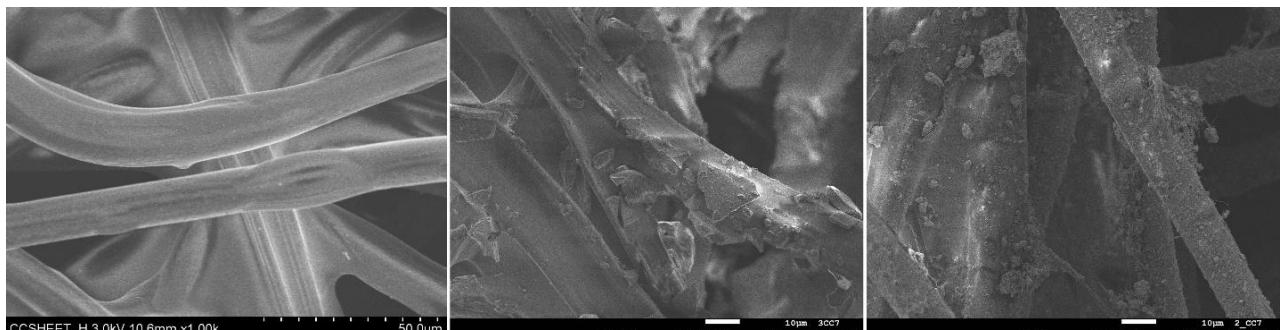


Fig. 1. From left to right: scanning electron microscopy images of native nonwoven textile, textile modified with biochar and textile modified with multi-walled carbon nanotubes. The magnification is 1000×.

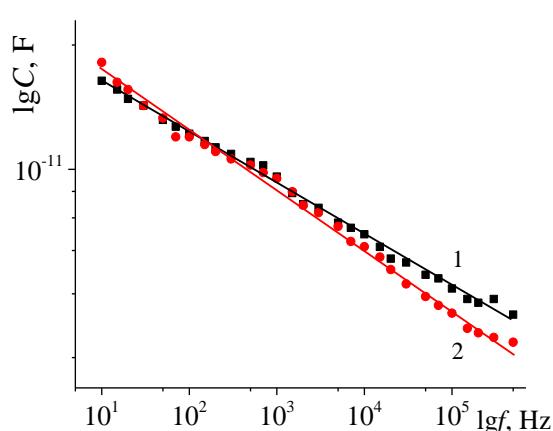


Fig. 2. Dependence of the logarithm of capacity on the logarithm of frequency for the nonwoven textile at the temperatures of 50 °C (1) and 60 °C (2).

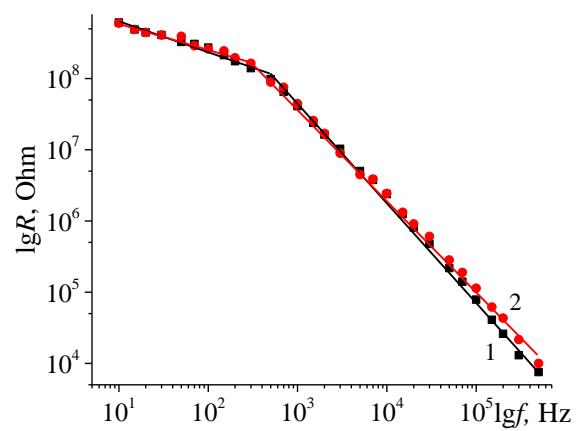


Fig. 3. Frequency dependences of the resistance of the nonwoven textile in the coordinates $\lg R = \varphi(\lg f)$ for the temperatures of 50 °C (1) and 60 °C (2).

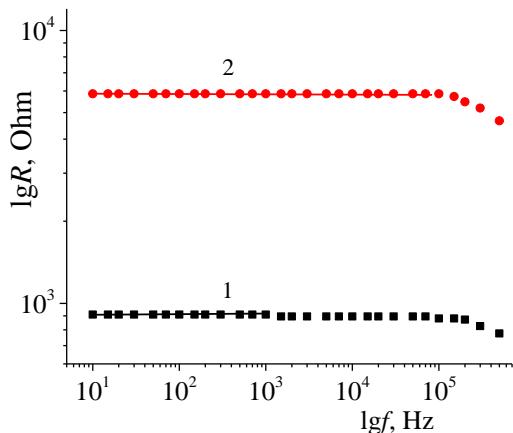


Fig. 4. Frequency dependences of the resistance of the nonwoven textile with biochar (1) and MWCNTs (2) at the temperature of 60 °C.

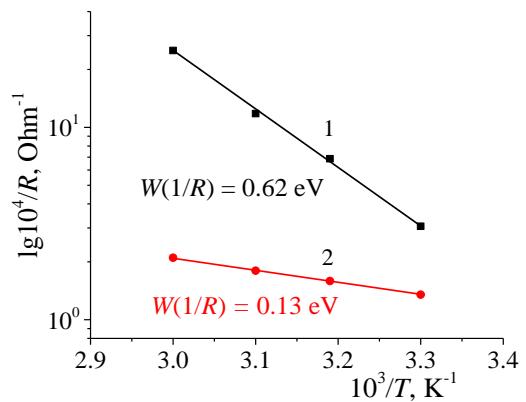


Fig. 5. Temperature dependence of the logarithm of the inverse resistance on the inverse absolute temperature for the nonwoven textile with biochar (1) and MWCNTs (2).

1. Since the investigated nonwoven textile samples without/with modification with biochar and multilayered carbon nanotubes had the same geometric dimensions and were heterogeneous in bulk, their dielectric properties were proposed to study based on the analysis of the frequency dependences of the resistance R (or $1/R$) and capacity C instead of analyzing the components of the complex dielectric permittivity.

2. It was shown that the capacity of the native nonwoven textile decreases with the frequency according to the power law regardless of the temperature. This dependence may be explained by the significant contribution of the dipole component of polarization of the nonwoven textile.

3. It was shown that in the presence of biochar and MWCNTs in the nonwoven textile, the resistance value decreases by more than 4 orders of magnitude. At the same time, as in the case of the temperature dependence of the capacity, the logarithm of the inverse resistance is a linear function of the inverse temperature.

4. The value of the activation energy of the temperature dependence of the inverse resistance of the samples as a function of the inverse absolute temperature was estimated. It was shown that in the case of MWCNTs modification, the activation energy of the temperature dependence of the logarithm of $1/R$ on $1/T$ is 0.19 eV, while it is equal to 0.62 eV in the presence of biochar in the nonwoven textile.

- Yamada Y. Dielectric properties of textile materials: Analytical approximations and experimental measurements – A review. *Textiles*. 2022. **2**. P. 50–80. <https://doi.org/10.3390/textiles2010004>.
- Mukherjee P.K., Das S. Improved analysis of the dielectric properties of textile materials. *J. Text. Inst.* 2021. **112**. P. 1890–1895. <https://doi.org/10.1080/00405000.2020.1859781>.

Physical properties of lead oxo apatites

N.A. Kurgan, V.L. Karbivskyy, I.V. Sukhenko, S.S. Smolyak
G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics of the NAS of Ukraine

Lead phosphate oxo apatite, with the chemical formula $\text{Pb}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{O}$, is a material that has been studied for its interesting properties [1]. It is not a straightforward semiconductor or dielectric in its pure form. However, its electronic properties can vary depending on its composition and structure. Recent studies have explored its potential as a host material for modifications with other elements, which can alter its electronic behavior such as semiconducting transport properties [2]. In this work the phosphate from the lead apatite structure $\text{Pb}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{O}$ has been replaced with vanadate. Their structures and properties have been compared.

Samples were synthesized by precipitation from ammonia solution using H_3PO_4 , NH_4VO_3 and $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ as reagents. After obtaining apatites, the samples were kept at 900°C (400°C for vanadate oxo apatite $\text{Pb}_{10}(\text{VO}_4)_6\text{O}$) in oxygen to obtain the final compounds.

The crystal structure investigations were carried out by X-ray diffraction analysis on Shimadzu LabX XRD-6000 with comparison data by density functional theory (DFT). The optical absorption spectra of the samples were obtained on Spekol 1500 spectrophotometer in the wavelength range of 190-1100 nm. The experimental value of the band gap width (E_g) was estimated using the Tauc equation [3].

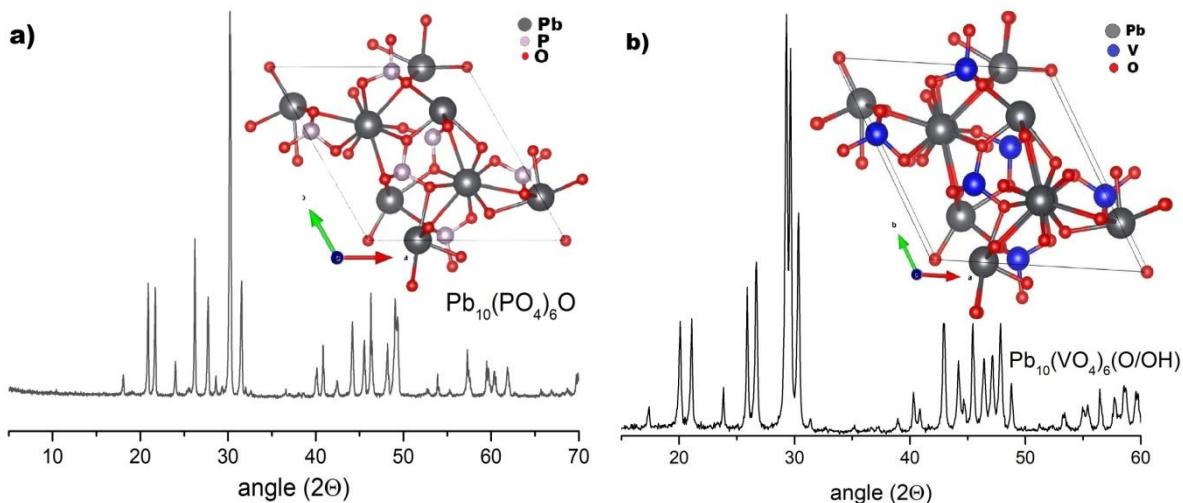


Fig. 1. Diffractograms and DFT calculation structure: a) $\text{Pb}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{O}$; b) $\text{Pb}_{10}(\text{VO}_4)_6\text{O}/\text{OH}$ (calculated structure for $\text{Pb}_{10}(\text{VO}_4)_6\text{O}$).

Samples were analyzed by X-ray diffraction method (Fig. 1). For $\text{Pb}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{O}$ the positions of the peak intensities are in perfect agreement with

the model compound from the open crystallographic COD database. For $\text{Pb}_{10}(\text{VO}_4)_6\text{O}$ small number of OH-groups are observed.

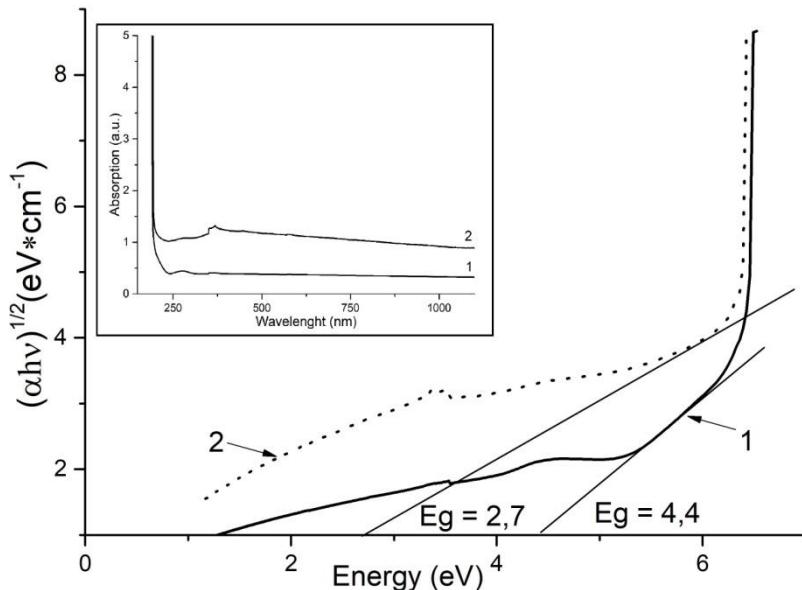


Fig. 2. Optical absorption spectra (inner part) and the band gap width for 1 - $\text{Pb}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{O}$, 2 - $\text{Pb}_{10}(\text{VO}_4)_6\text{O}/\text{OH}$ samples.

The band gap width calculated from the absorption spectra for the samples shown decreasing E_g value from 4.4 eV to 2.7 eV at replacement phosphate by vanadate in the lead apatite structure (Fig. 2). Thus, the ability to control the band gap of lead oxo apatites, the way of isomorphic substitutions in anionic position, opens up new possibilities for their practical application such as semiconducting materials.

Acknowledgments. The authors acknowledge the financial support of the National Research Foundation of Ukraine (Grant No. 2023.03/0242).

1. Ptáček, P. (2016). Substituents and Dopants in the Structure of Apatite. *InTech*. <https://doi.org/10.5772/62213>
2. Shen, J., Gaines, D., Shahabfar, S., Li, Z., Kang, D., Griesemer, S., Salgado-Casanova, A., Liu, T., Chou, C., Xia, Y., & Wolverton, C. (2023). Phase Stability of Lead Phosphate Apatite $\text{Pb}_{10-x}\text{Cu}_x(\text{PO}_4)_6\text{O}$, $\text{Pb}_{10-x}\text{Cu}_x(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ ($x = 0, 1$), and $\text{Pb}_8\text{Cu}_2(\text{PO}_4)_6$. *Chemistry of Materials*, 36(1), 275–285. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.3c02054>
3. Karbivskyy, V., Kurgan, N., Huntush, M., Romansky, A., Karbivska, L., & Zaika, V. (2023). Spectral and quantum mechanical investigation of calcium apatites isomorphically substituted in the anionic sublattice. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 264, 147316. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2023.147316>

Кінетичні ефекти в одновісно деформованому n-Ge

С.В. Луньов¹, П.Ф. Назарчук¹, О.В. Бурбан², В.М. Єрмаков³

¹*Луцький національний технічний університет,*

бул. Львівська 75, м. Луцьк, 43018, Україна

²*Волинський фаховий коледж Національного університету харчових технологій,*

бул. Кафедральна, 6, м. Луцьк, 43016, Україна

³*Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України*

просп. Науки 41, м. Київ, 03028, Україна

Відомо, що ефекти за участю нерівноважних гарячих носіїв або рівноважних носіїв при сильних одновісних тисках використовуються для вивчення вкладу високоенергетичних мінімумів зони провідності германію в різні кінетичні ефекти [1-3]. Врахування ролі цих ефектів є важливим при конструюванні на основі напівпровідникових структур германію різних електронних приладів, які можуть працювати в сильних електрических або деформаційних, при наявності в таких структурах внутрішніх механічних напружень. Не зважаючи на інтенсивні дослідження тензоэффектів в германії, які були проведені за останні десятиліття, залишається актуальним комплексне вивчення впливу сильних одновісних тисків та електрических полів на електропровідність германію.

Тому нами досліджувались температурні залежності питомого опору та вольтамперні характеристики для одновісно деформованого вздовж кристалографічного напрямку [100] германію, легованого домішкою Sb. Крім добре відомих механізмів фононного розсіяння, можливим в германії є також нееквівалентне міждолинне розсіяння електронів між L_1 -та Δ_1 -мінімумами. В області незначних електрических полів та невисоких температур енергія електронів буде набагато меншою за величину енергетичної щілини між цими мінімумами, яка рівна 0,18 eВ для недеформованого n-Ge. При цьому всі електрони будуть знаходитись в L_1 мінімумах і даний механізм розсіяння не буде спостерігатись. Але в умовах сильних електрических полів або при дії значних деформаційних полів, що призводять до зменшення енергетичної щілини між L_1 -та Δ_1 -мінімумами, розсіяння електронів між цими мінімумами може бути суттєвим і відповідно впливатиме на електропровідність германію. Як показують дослідження тензоэффектів, для високих тисків $P=2,8$ ГПа нееквівалентним міждолинним розсіянням електронів можна знехтувати та повністю обмежитись лише механізми розсіяння електронів в L_1 -та Δ_1 -моделях зони провідності германію. Для області одновісних тисків від 1,4 до 2,3 ГПа необхідно вже враховувати нееквівалентне міждолинне розсіяння. Як показують дослідження, також проявляється вклад Δ_1 -мінімумів на трансформацію вольтамперних характеристиках одновісно деформованого n-Ge, одержаних в сильних електрических полях. Проте, в даному випадку за

рахунок того, що електрон одержує додаткову енергію від електричного поля, заселення електронами Δ_1 -мінімумів зони провідності германію буде мати місце при $P>0,3$ ГПа та електричних полях $E>3$ кВ/см. З подальшим збільшенням одновісної деформації внесок Δ_1 -мінімумів в розігрів електронів стає все більш істотним, та після $(L_1-\Delta_1)$ - інверсії типу абсолютноого при $P>2,1$ ГПа – визначальним. Зростання одновісного тиску призводить до зменшення величини напруженості електричного поля, при якій розпочинається заселеність електронами Δ_1 -долин. Участь так званих «кремнієвих» долин с-зони германію в явищах переносу в гріючих електричних полях при $P=0$, як показують експерименти, не проявляється при значеннях напруженості електричного поля до 8 кВ/см. В той час як теоретичні розрахунки, виконанні в роботі [4], передбачають наявність заселеності Δ_1 -долин вже при полях $E>3$ кВ/см. Як слідує з одержаних залежностей питомого опору та вольтамперних характеристик для одновісно деформованого n-Ge заселеність електронами Δ_1 -долин призводить до зменшення електропровідності германію за рахунок того, що рухливість електронів для Δ_1 -долин є меншою, ніж для L_1 -долин.

Тому конструктування електронних пристріїв та сенсорів, виготовлених на основі напівпровідниковых структур германію, які функціонують в умовах сильних електричних або деформаційних полів, вимагає врахування впливу Δ_1 –мінімумів в різні кінетичні ефекти та відповідно на робочі характеристики самих пристріїв та сенсорів. Зокрема, в гетероструктурах, виготовлених на основі германію, заселеність електронами Δ_1 -долин може відбуватись при невеликих значеннях електричних полів, оскільки зонна структура таких гетероструктур зазнає кардинальних змін за рахунок існування в них значних внутрішніх напружень.

4. Charge-carrier collective motion in germanium detectors for $\beta\beta$ -decay searches / T. Comellato, M. Agostini, S. Schönert. *The European Physical Journal C*. 2021. Vol 81. P. 76.
5. Determination of the scattering length ($\Gamma \rightarrow L$) by the electrically pumped Germanium Zener Emitter / M. Hack, L.Seidel, M. Wanitzek, M. Oehme, A. Daus, J. Schulze, D.Schwarz, (2025). *IEEE Photonics Technology Letters*. 2025. Vol. 37. P. 409–412.
6. The impact of intrinsic conductivity on the mechanisms of tensoresistance of uniaxially deformed n-Ge single crystals / S.V. Luniov. *Journal of Physical Studies*. 2019. Vol.23, № 3. P. 3701.
7. Electron drift velocity and diffusivity in germanium / C. Jacoboni, F. Nava, C. Canali [and others]. *Phys. Rev. B*. 1981. V. 24. P. 1014.

Трибоелектричний наногенератор на основі зім'ятих золотих плівок: розрахунки з перших принципів

Пресс В.М., Балабай Р.М., Ніколенко В.Б.

Криворізький державний педагогічний університет,

пр. Університетський, 54, 50086, Кривий Ріг, Україна

Швидко розвивається портативна електроніка для слідкуванням за здоров'ям, захисту навколошнього середовища та моніторингу інфраструктур. Забезпечення живленням таких пристрій залишається викликом через обмежену технологічність акумуляторів. Тому легкі та стійкі джерела живлення досі є актуальною проблемою. Останнім часом трибоелектричні наногенератори (ТЕНГ), які базуються на явищах трибоелектризації та електростатичної індукції, продемонстрували просту, економічно ефективну та універсальну технологію збору енергії [1]. Вони є перспективними кандидатами для реалізації різних автономних систем. На сьогодні було розроблено різні стратегії для підвищення продуктивності виходу ТЕН, включаючи модифікацію поверхні, композицію матеріалів, інжекцію зарядів, оптимізацію архітектури тощо. Однак більшість із цих підходів мають фінансові та технологічні обмеження у практичному застосуванні. Нещодавно дослідники [2] продемонстрували простий та економічно ефективний метод досягнення більшої вихідної потужності завдяки використанню структур і пристрій із малими розмірами на основі зім'ятих шарів графену. Проте максимальна потужність і термін служби цих пристрій були обмежені через ненадійність графену. У подальших своїх дослідженнях автори [3] запропонували гнучкий трибоелектричний наногенератор на основі зім'ятих золотих (Au) плівок. Введення зім'ятої морфології в тонку плівку золота замість складного літографічного процесу дозволило суттєво покращити продуктивність виходу. ТЕНГ на основі трибоелектричного контакту площею у $1,5 \text{ см}^2$ плівки зім'ятоого золота з шаром полідиметилсилоксану генерував при стискаючому зусиллі $\sim 20 \text{ Н}$ вихідну напругу $100,2 \text{ В}$ і густину струму $9,14 \mu\text{A}/\text{см}^2$, що було у 7 разів вище за напругою та у 6 разів за густину струму порівняно з ТЕНГ на основі пласких золотих плівок.

Для оцінки впливу ступеню зім'ястості у структурі золотих плівок та стискаючого зусилля (рис. 1) на вихідну продуктивність ТЕНГ були започатковані чисельні дослідження методами теорії функціоналу густини та першопринципного псевдопотенціалу на основі власного програмного коду [4]. Розраховано та обговорено просторові розподіли густини валентних електронів і кулонівського потенціалу в поперечному

напрямку трибоелектричного контакту, значення електричних зарядів в околі остатків атомів Au, що перебувають у трибоелектричному kontaktі.

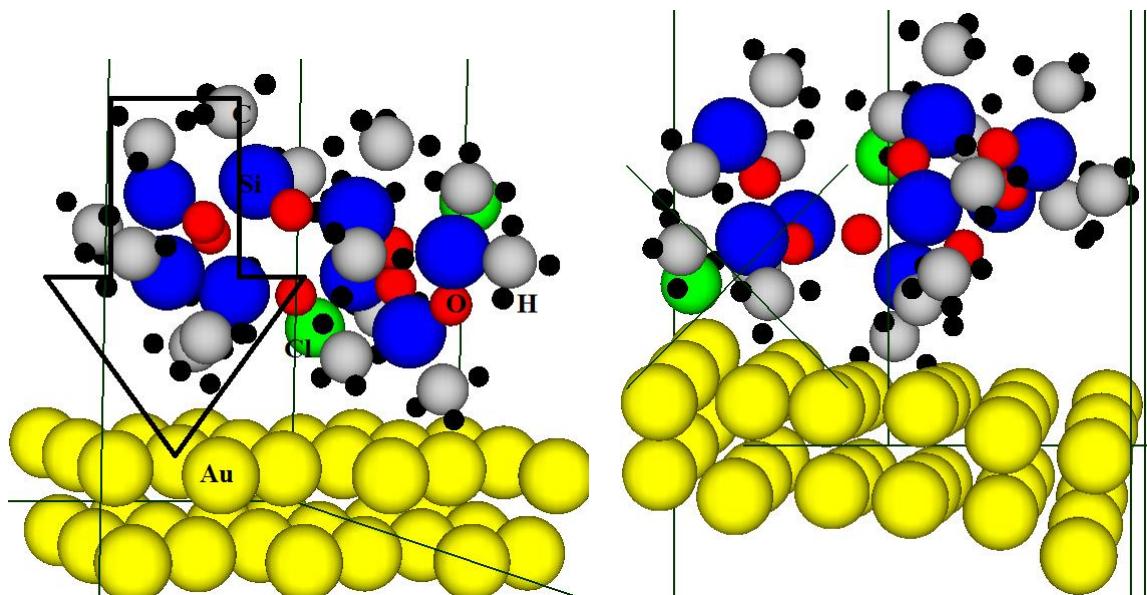


Рис. 1. Зовнішня сила забезпечує трибоелектричний контакт пласкої (зліва) та зім'ятої плівки (справа) золота із шаром силикону (полидиметилсилоксан). Вид на одиничні комірки суперрешітки, що відтворюють при трансляції нескінченну двошарову плівку золота

1. Shi, Z., Zhang, Y., Gu, J., Liu, B., Fu, H., Liang, H., & Ji, J. (2024). Triboelectric Nanogenerators: State of the Art. *Sensors*, 24(13), 4298. <https://doi.org/10.3390/s24134298>
2. Chen H, Xu Y, Bai L, Jiang Y, Zhang J, Zhao C, Li T, Yu H, Song G, Zhang N, Gan Q (2017) Crumpled graphene triboelectric nanogenerators: smaller devices with higher output performance. *Adv Mater Technol* 2(6):1700044. <https://doi.org/10.1002/admt.201700044>
3. Chen, H., Bai, L., Li, T., Zhao, C., Zhang, J., Zhang, N., Song, G., Gan, Q., & Xu, Y. (2018). Wearable and robust triboelectric nanogenerator based on crumpled gold films. *Nano Energy*, 46, 73-80. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2018.01.032>
4. Press V.M., Balabai R.M. Tribovoltaic effect at the water-silicon interface. The International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2024). *Abstract Book of participants of the International research and practice conference, Uzhhorod, 21–24 August 2024, Kyiv.* P.370. https://drive.google.com/file/d/1_I2sb5lRxa8SC-TPSjnFYNrr103akqQp/view?usp=sharing

Structure and optical properties of lead vanadate apatite with copper substitution

N.A. Kurgan, V.L. Karbivskyy, I.V. Sukhenko, S.I. Shulyma
G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics of the NAS of Ukraine

Lead vanadate apatite represents a fascinating class of compounds with versatile structural and functional properties, making it a subject of significant scientific interest. Recent advancements in material science have highlighted the potential of substituting elements within the apatite structure to tailor and enhance its physical characteristics [1-2]. In this study, we explore the effects of copper substitution on the structure and optical properties of lead vanadate apatite. Through detailed analysis and experimentation, this work aims to uncover the relationship between compositional variations and resultant material behavior, shedding light on the potential applications of these novel materials in optical and electronic technologies.

Samples were synthesized by precipitation from ammonia solution and potassium hydroxide using NH_4VO_3 , $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ as reagents. The crystal structure investigations were carried out by X-ray diffraction analysis on Shimadzu LabX XRD-6000 with comparison data by density functional theory (DFT). The optical absorption spectra of the samples were obtained on a Spekol 1500 spectrophotometer in the wavelength range of 190-1100 nm. The experimental value of the band gap width (E_g) was estimated using the Tauc equation [1].

Samples were analyzed by X-ray diffraction method (Fig. 1). When lead atoms are replaced by copper, new peaks appear at 35 and 28 degrees. The obtained experimental results are in good agreement with the calculations with the location of copper atoms in the first position of the apatite structure.

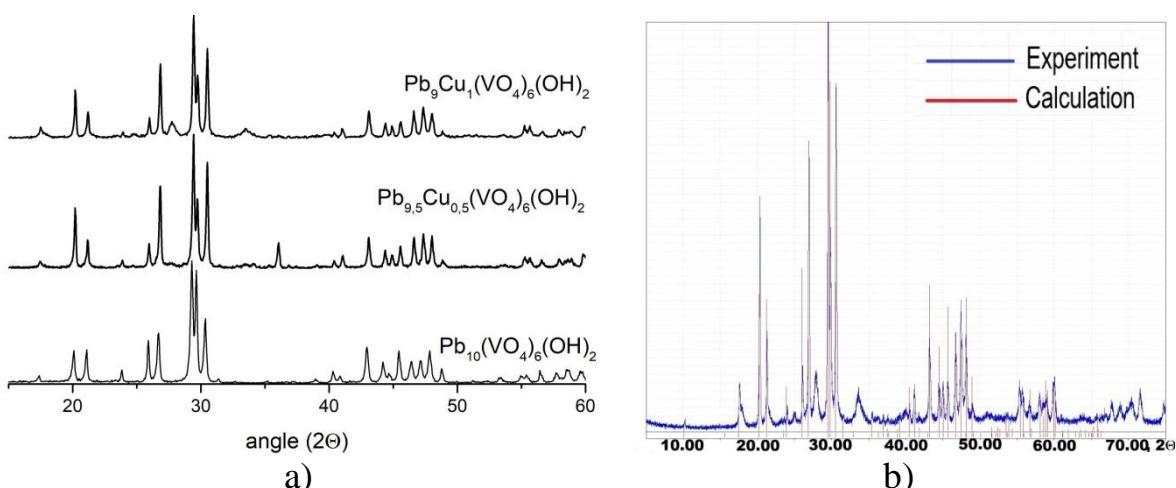


Fig. 1. a) Diffractograms of the investigation samples; b) XRD experimental data compared with DFT calculation, where Cu atom occupied the first position in the apatite structure for $\text{Pb}_9\text{Cu}_1(\text{VO}_4)_6(\text{OH})_2$.

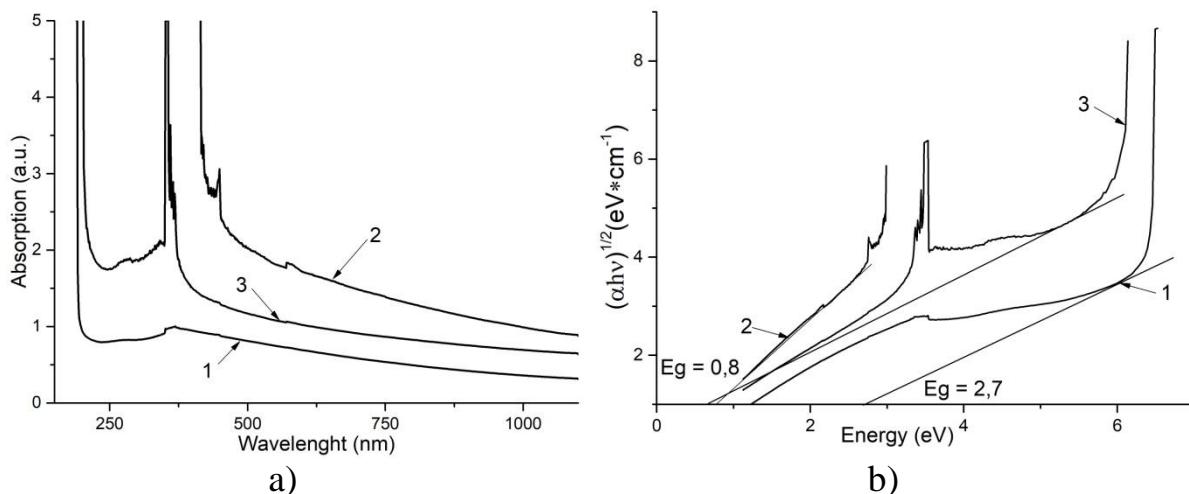


Fig. 2. Optical absorption spectra (a) and the band gap width (b) for samples: 1 - $\text{Pb}_{10}(\text{VO}_4)_6(\text{OH})_2$, 2 - $\text{Pb}_{9.5}\text{Cu}_{0.5}(\text{VO}_4)_6(\text{OH})_2$, 3 - $\text{Pb}_9\text{Cu}_1(\text{VO}_4)_6(\text{OH})_2$.

The optical absorption spectra of isomorphically substituted vanadate apatites in the cationic sublattice are shown in Figure 2(a). When Pb is partially substituted by Cu in vanadate apatite, additional features in the range of 350-500 nm appear due to the formation of oxygen vacancies and are the result of a decrease in the ionic charge of metal atoms inside the sample.

The width of the energy gap calculated from the absorption spectra for pure lead vanadate is 2.7 eV (Fig. 2b). For the samples isomorphically substituted in the cationic sublattice, a narrowing of the energy gap to ~ 0.8 eV is observed. That is, the isomorphic substitution of lead by copper atoms in the apatite structure leads to the appearance of additional energy levels in the crystal's band gap and causes a narrowing of the band gap width. These phenomena are of great importance for the creation of new materials with controlled properties, for example, in photocatalysis, thermoelectricity, or sensors.

Acknowledgments. The authors acknowledge the financial support of the National Research Foundation of Ukraine, Grant No. 2023.03/0242.

1. Karbivskyy, V., Kurgan, N., Hantusch, M., Romansky, A., Sukhenko, I., & Karbivska, L. (2024). Design of the electronic structure and properties of calcium apatites via isomorphic modification of the cation sublattice, and prospects of their application. *Journal of Applied Physics*, 135(6). <https://doi.org/10.1063/5.0179754>
2. Shen, J., Gaines, D., Shahabfar, S., Li, Z., Kang, D., Griesemer, S., Salgado-Casanova, A., Liu, T., Chou, C., Xia, Y., & Wolverton, C. (2023). Phase Stability of Lead Phosphate Apatite $\text{Pb}_{10-x}\text{Cu}_x(\text{PO}_4)_6\text{O}$, $\text{Pb}_{10-x}\text{Cu}_x(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ ($x = 0, 1$), and $\text{Pb}_8\text{Cu}_2(\text{PO}_4)_6$. *Chemistry of Materials*, 36(1), 275–285. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.3c02054>

The influence of the crystal lattice thermal vibrations on the RKKY interaction in $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ single crystals

V. E. Slynko¹, L. Kilanski², B. Brodowska², O. A. Sydor¹, V. M. Vodopyanov¹

¹ Chernivtsi Branch of Frantsevych Institute for Problems of Materials Science, NASU,

Iryny Vilde 5, Chernivtsi, 58001, Ukraine

² Institute of Physics, Polish Academy of Sciences,

Aleja Lotników 32/46, PL-02668 Warsaw, Poland

Diluted magnetic semiconductors (DMS) based on A^4B^6 compounds doped with magnetic impurities are of considerable scientific and practical interest due to the unique combination of their electrical, magnetic and optical properties. They have a cubic crystal structure of the NaCl type. If to imagine it in the form of harmonic oscillators-balls connected by “springs” of ionic-covalent bonds, then at $T>0$ K such a system will look as an extremely dynamic object saturated with the internal oscillatory motion of individual atoms at their natural frequencies in all three spatial dimensions. With increasing temperature, the intensity of this motion will increase together with the amplitude of oscillations, despite a slight decrease in their frequency due to an increase in the crystal lattice parameter $a\sim 6$ Å during thermal expansion.

The magnetic impurity atoms (whose distribution fluctuations in the crystal volume can be neglected here) form a separate vibrational subsystem. Inside this subsystem there is a certain critical distance R , approaching which two oscillating magnetic atoms can enter into RKKY interaction [1] (through charge carriers), which orients their magnetic moments in parallel.

At this moment, a dynamic magnetic cluster (DMC) arises whose total magnetic moment consists of parallel magnetic moments of the two atoms. At the lowest temperatures, when the amplitude of the oscillations is minimal, DMCs are dumbbell-like one-dimensional (1D) pairs of magnetic ions. With a gradual increase in temperature and the amplitude of harmonic oscillations, the magnetic atoms begin to form dynamic magnetic complexes consisting of three atoms, i.e. 2D magnetic clusters in the form of triangles. With a further increase in temperature, not exceeding a certain value, 3D dynamic magnetic clusters arise, the simplest of which have the shape of tetrahedra.

When a certain critical temperature Θ is exceeded (which is called the Curie-Weiss temperature), disorder of magnetic moments occurs, associated with the scattering of charge carriers on acoustic and optical phonons. Thus, the spatial dimension of DMCs increases from 1D to 3D with increasing temperature. Single magnetic atoms have spatial dimension of 0D and can be considered degenerate DMCs. All of the above leads us to a simple and logical explanation of the numerous results of magnetic measurements on $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ (GSMT) single crystals (Fig. 1-a).

The experimental temperature dependence of the real part of the dynamic magnetic susceptibility $\text{Re}(\chi_{\text{AC}})(T)$ has the form of a two-humped curve, which is fitted with high accuracy by the sum of four Gaussian curves. Each Gaussian curve corresponds to a separate magnetic subsystem, which is formed by DMCs of the corresponding dimension. It is important to note that each magnetic subsystem has its own set of critical temperatures Θ , T_C , T_F , T_K and β (Fig. 1-b) affecting their resulting values (Fig. 1-a).

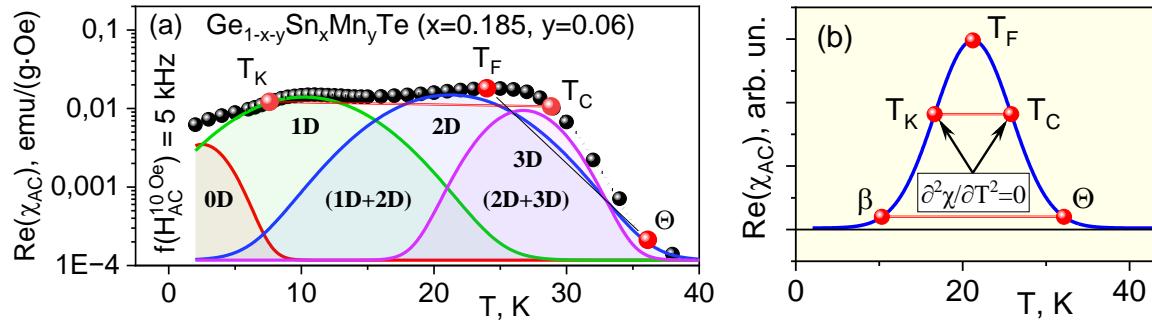


Fig. 1 – a) four types of dynamic cluster magnetic subsystems in GSMT; b) critical temperatures, K: Θ (Curie-Weiss), T_C (Curie), T_F (spin freezing beginning when cooling), T_K (Kilanski), β (Kilanski-Slynko)

The overlap of the Gaussian curves corresponds to the coexistence of different magnetic phases at different fixed temperatures. In practice, this means that spin glass (SG) [2] and cluster glass (CG) always coexist in DMSs with the ferromagnetic phase (FM), which is confirmed by the presence of magnetic hysteresis loops in the entire temperature interval where the dynamic magnetic susceptibility has non-zero values.

A convenient measure for determining this interval is the segment connecting the critical temperatures T_K and T_C . Both of them are determined at the inflection points on the experimental dependences $\text{Re}(\chi_{\text{AC}})(T)$, where their second derivatives are equal to zero: $\partial^2\chi/\partial T^2=0$ (Fig. 1-a,b).

Depending on the content of magnetic and non-magnetic impurities, the experimental dependences $\text{Re}(\chi_{\text{AC}})(T)$ can have a different shape, which in some cases almost exactly coincides with the normal Gaussian distribution. This indicates, firstly, the correctness of the choice of Gaussian curves for approximating this type of dependences. Secondly, it indicates a different number of magnetic subsystems in DMSs samples of different compositions.

The simultaneous use of several magnetic phases in spintronic devices for processing and storing information can lead to a significant increase in the speed of the former and the capacity of the latter.

[1] Leon A. O. et al. Manipulation of the RKKY exchange by voltages // Physical Review B. – 2019. – V. 100(1). – P. 014403-1-6. doi:10.1103/physrevb.100.014403

[2] Krempaský et al. Efficient magnetic switching in a correlated spin glass // Nature Commun. – 2023. – V. 14. – P. 6127-1-12. <https://doi.org/10.1038/s41467-023-41718-4>

Адгезія кристалічного СО₂ до алюмінію: розрахунки з перших принципів

Степанюк О.М., Балабай Р.М.

Криворізький державний педагогічний університет,

пр. Університетський, 54, 50086, Кривий Ріг, Україна

На Землі температурний режим такий, що вода, як правило, знаходиться досить близько до точки замерзання і сніговий покров на її поверхні або є сезонним або триває постійно. У зв'язку з чим були актуальними наші попередні дослідження механізмів адгезії кристалічної води до алюмінію та графену [1].

На Марсі, як і на Землі, присутність льоду також відіграє важливу роль у великомасштабних кліматичних процесах [2]. Немає ніяких доказів того, що заморожений СО₂ природним чином зустрічається на поверхні Землі або в її атмосфері, відомо, що твердий СО₂ існує на полярних шапках Марса [Kuiper, 1949; Лейтон і Мюррей, 1966; Herr and Pimental, 1969]. Фактично, полярні шапки Марса і, можливо, супутника Нептуна Тритона, мають єдині відомі природні відкладення інею СО₂ у Сонячній системі [Calvin, 1990; Хансен, 1997]. Залишкові північна та південна шапки є постійними елементами і можуть мати кілометр або більше завтовшки. Товщина сезонного покрову може перевищувати метр у високих широтах, але ймовірно менше кількох сантиметрів у нижчих широтах. Гесс та ін. (1979) оцінили товщину снігових шарів (що складаються із замерзлого H₂O і замерзлого СO₂) у кілька десятків сантиметрів. Одне з найбільш важливих висновків місії Viking було зроблено Kieffer [1979] та Hess et al. (1979), який показав, що залишкова північна шапка Марса - це лід H₂O, а залишкова південна шапка - лід CO₂.

Перший контакт із поверхнею Марсу був здійснений радянськими зондами: спускним апаратом «Марс-2» 27 листопада 1971 року і апаратом «Марс-3» 2 грудня 1971 року. Приблизно 2/3 всіх космічний апаратів зазнали невдачі і не виконали своїх місій, тому система Марса має статус складної цілі для досліджень. Однак, попереду неминучі як непілотовані так і пілотовані контакти механізмів з поверхнею Марсу у тому числі, що покриті замороженим кристалічним СО₂. Однак, перш ніж реалізувати стратегію зондування, необхідні експерименти моделювання, необхідно розуміння фізики взаємодії з кристалами СО₂», щоб підвищити надійність місій на Марс.

Заморожені кристали вуглекислого газу, які спостерігаються в лабораторії, значно менші, ніж кристали води, і, на відміну від гексагональної структури кристалів H₂O, кристали СО₂ належать до

кубічної просторової групи [3]. Порівняно з кристалами H_2O , така ж різноманітність кристалічних форм не спостерігалася в лабораторії для замороженого CO_2 .

Дана робота являє собою новий внесок в теоретичний аналіз адгезійних контактів кристаликів CO_2 та плівкового алюмінію, який буде ймовірно використовуватися як матеріал покриття марсоходів (рис.1).

Нами були оцінені енергетичні рельєфи відризу кристаликів CO_2 від поверхні плівки алюмінію, розраховані електричні заряди в околі атомів, що адгезійно взаємодіють, та сили, що діють на ці атоми з боку решти електронно-ядерного оточення - методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів за допомогою власного програмного коду.

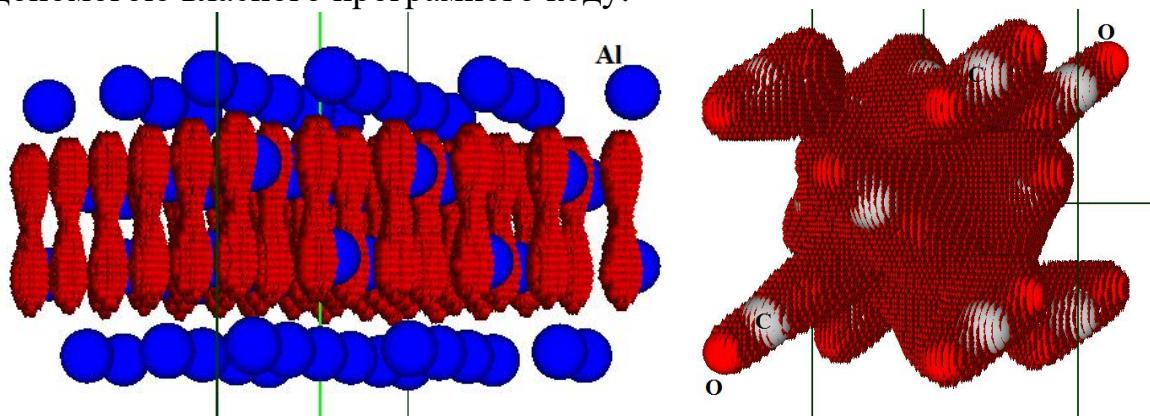


Рис. 1. Просторові розподіли густини валентних електронів в межах 4-ї шарової плівки Al для ізозначення 0,9 - 1,0 від максимального (зліва) та кристалика CO_2 для ізозначення 0,7 - 0,8 від максимального (справа). До адгезійного контакту

1. O.M. Stepanyuk, R.M. Balabai. Understanding from first principles of the mechanism of ice-solid adhesion. The International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2024). Abstract Book of participants of the International research and practice conference, Uzhorod, 21–24 August 2024. Kyiv, 2024. P. 374.
https://drive.google.com/file/d/1_I2sb5lRxa8SC-TPSjnFYNrr103akqQp/view?usp=sharing

2. J. L. Foster, A. T. C. Chang, and D. K. Hall, W. P. Wergin and E.F. Erbe, J. Barton. Carbon dioxide crystals: An examination of their size, shape, and scattering properties at 37 GHz and comparisons with water ice (snow) measurements // JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH, VOL. 103, NO. E11, PAGES 25,839-25,850, OCTOBER 25, 1998

3. T.P. Mangan, C.G. Salzmann, J.M.C. Plane, B.J. Murray. CO_2 ice structure and density under Martian atmospheric conditions // Icarus (2017) 1-8.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2017.03.012>

Laser-induced optical breakdown of solids

Trokhimchuk Petro

A. V. Svidzynskyi Department of Theoretical and Computer Physics,

Lesia Ukrainka Volyn National University,

13 Voli Ave., Lutsk, Ukraine, 43025

tropet1650@gmail.com, Trokhimchuk.Petro@vnu.edu.ua

According to Wikipedia laser-induced optical breakdown (LIOB) is a phenomenon that occurs when short-pulsed high-energy lasers (as Q-switched nanosecond, picosecond or femtosecond pulse lasers) induce deep dermal cavitation as result of a non-thermal photomechanical effect. We must precise this definition and show the influence of structure of irradiated matter and conditions of irradiation on formation this phenomenon.

First experimental data were received by E. Yablonovich [1]. Two damages region in a crystal with moderately high density of inclusions were received in [1] for potassium chloride KCl after irradiation by CO_2 -laser pulses (wavelength $10,6 \mu m$, duration of pulse $30 ns$). The laser was known to be operating in the lowest-order transverse Gaussian mode (TEM_{01}). There were several longitudinal modes, however, which contributed a time structure to the pulse, periodic at the cavity round-trip time. The phase relationships between the longitudinal modes varied from shot to shot, changing the details of the time structure and causing the peak of the envelope to fluctuate by $\pm 15\%$ [1].

Successive laser shot (1/sec) were focused into bulk single crystals using a 1-inch focal length “Irtran 2” lens [1]. The breakdown was monitored by observing the visible light from the focal region and by examining the damaged region under the microscope. It was found that most of the crystals suffered some damage even at relatively low power levels. The threshold of this type of damage varied by an order magnitude from one position in the crystal to another. At any particular energy level, damage would occur on the first laser shot or not at all. It was showing that spatial heterogeneities are in fact inclusions [1]. The damage bubbles occur randomly near, not necessarily in, the tiny focal volume. At a well-defined power threshold, an elongated pointed bubble forms, its vertex falling at the focus [1]. This power level is regarded as the bulk intrinsic breakdown threshold. Its value is reproducible in crystals from different manufacturers, with inclusions or without. When no inclusion free samples of a compound were available, the considerations mentioned above were using to determine the dielectric strength [1]. The main registration method was a photocamera (resolution 2-3 microns) [1].

Experimental data for SiC , which are included microscopic structure of optical breakdown, are represented in [2, 3]. Parameters of focused irradiation are next: wavelength $0.6 \mu m$, duration of pulse $130 fs$, mode TEM_{00} . Sectional area of receiving structures was $\sim 22 \mu m$, the depth of $\sim 50 \mu m$. We have five stages disordered regions, which are located at a distance from 2 to 4 μm apart

vertically [2, 3]. Branches themselves in this case have a thickness from 150 to 300 nm. In this case, there are lines in the irradiated nanocavity with spherical diameter of from 10 nm to 20 nm [3]. In this case, irradiated structures have crystallographic symmetry of the initial structure. Diffraction processes may be generating in two stages: 1 – formation of diffraction rings of focused beams [4] and second-formation of diffracting gratings in the time of redistribution of second-order Cherenkov radiation [4]. Second case is analogous to the creation of self-diffraction gratings in Nonlinear Optics, but for case of [2, 3] our gratings are limited by Much cone of Cherenkov radiation [4]. Roughly speaking only results of [2, 3] are represented “clean” breakdown. The main registration method was an electron microscopy (resolution 3 nanometers). Two types of models have been proposed for explain these results.

The first type is plasma models: it is postulated that there is "dirt" in the irradiated material, which is the seed for the initiation of plasma breakdown [5]. It should be noted that the absorption coefficient of incident radiation in the irradiated material is of the order of $0.01 - 0.001 \text{ cm}^{-1}$ [4]. Main disadvantage of these models is the detailing and finding the dirt that provides the initial light absorption.

The second type of models are basing on a nonlinear optical cascade of transformations of incident radiation, including a change in its spectral composition, which leads to optical breakdown [4]. This cascade include next stages: diffraction stratification; formation cones of Cherenkov radiation: each diffraction cone has its own Cherenkov cone (the generators of these cones are mutually perpendicular); interference of the short-wavelength part of Cherenkov radiation, which leads to the actual optical breakdown. When creating these models, the theories and models of Rayleigh, E. Fermi, A. Bohr, and I. Golub were adapted. In addition, this method allowed us to explain the experimental results and develop the foundations theory of electromagnetic shock processes (for this purpose, the concepts of photon efficiency and coherence zone were introduced) [4].

1. Yablonovich E. Optical Dielectric Strength of AlkaliHalide Crystals Obtained by Laserinduced Breakdown. *Appl. Phys. Lett.*, vol.19, is.11, 1971. P.495-497.
2. Okada T., Tomita T., Matsuo S., Hashimoto S., Ishida Y., Kiyama S., Takahashi T. Formation of periodic strain layers associated with nanovoids inside a silicon carbide single crystal induced by femtosecond laser irradiation. *J. Appl. Phys.*, v. 106, p.054307, 2009. 5 p.
3. Okada T., Tomita T., Matsuo S., Hashimoto S., Kashino R., Ito T. Formation of nanovoids in femtosecond laser irradiated single crystal silicon carbide. *Material Science Forum*, vol. 725, 2012. P.19 – 22.
4. Trokhimchuk P. P. Relaxed Optics: Modelling and Discussions 3. New Dehli: Bright Sky Publications, 2024. 242 p.
5. Kroll N., Watson K. M. Theoretical Study of Ionization of Air by Intense Laser Pulses. *Phys. Rev. A*, vol.5, is. 4, 1972. P.1883-1905.

Ударна іонізація мілких донорів в Si та Ge в умовах деформаційно-індукованого переходу метал-ізолятор.

Л. Панасюк, Д. Захарчук, С. Федосов, Ю. Коваль, Л. Ящинський
Луцький національний технічний університет, вул. Львівська 75,
43018 Луцьк, Україна
e-mail: leonid9030@gmail.com

Аналізуючи температурні залежності питомого опору та вольт-амперні характеристики (ВАХ) при різних значеннях одновісного тиску (ОТ) X, досліджено залежності енергії активації E_a від тиску та поля ударної іонізації $E_{уд}$ від енергії активації в області деформаційно-індукованого переходу метал-ізолятор (МІ) в кремнії та германії, легованих мілкими донорами Sb і P.

Перехід МІ, за рахунок перебудови структури енергетичного спектру зони провідності, було досліджено [1] для вироджених кристалів n-Si(Sb, P) та n-Ge(Sb) в області високого ОТ. Аналіз експериментальних даних дослідження особливостей трансформації енергетичного спектру в сильно деформованих кристалах дає можливість визначити характерні орієнтації одновісного тиску, які зумовлюють перехід від металевого типу провідності до активаційного як для кремнію, так і для германію: $X|[111]$ – в n-Si і $X|[001]$ – в n-Ge.

В кристалах n-Si перехід МІ пов'язаний з деформаційною непарараболічністю Δ_1 - долин [2] яка виникає внаслідок зняття при $X/[111]$ виродження Δ_1 і Δ'_2 -гілок зони провідності в точці X_1 на краю зони Бріллюен, а в кристалах n-Ge – $L_1 \rightarrow \Delta_1$ -інверсією типу абсолютноного мінімуму зони провідності при $X/[001]$ [3]. В обох випадках в результаті такої перебудови відбувається істотне збільшення поперечної складової ефективної маси електрона m^* . В результаті енергія основного стану мілких донорів, яка визначається як $E_0 = -\frac{m^* e^4}{2h^2 \chi^2}$, [4], помітно зростає.

Збільшення ефективної маси електрона із зростанням одновісного тиску приводить до відповідного зменшення боровського радіуса валентного електрона ($a_b = h^2 \chi / m^* e^2$) і його локалізації на домішковому центрі та здійснення переходу метал-ізолятор.

На ізоляторному боці індукованого деформацією переходу МІ генерація вільних електронів може відбуватися, зокрема, шляхом ударної іонізації локалізованих станів. Тому особливості ВАХ безпосередньо відображатимуть характерні властивості деформаційної локалізації електронів та їх зростання в умовах пробою при низькій температурі та в області високого ОТ. Характерною особливістю отриманих вольт-амперних характеристик як при струмовому, так і при

імпульсному режимах являється трансформація лінійних, при відсутності одновісної деформації, ВАХ у нелінійні S-подібні при збільшенні X як для кристалів n-Si ($X \parallel [111]$), так і n-Ge ($X \parallel [001]$). Оскільки S-подібні ВАХ недеформованих кристалів із середнім рівнем легування пов'язані з σ_2 -провідністю, можна ідентифікувати деформаційно-індукований перехід від металевого до активаційного типу провідності в сильно легованих кристалах n-Si і n-Ge, просто як перехід до σ_2 -проводності.

Для ударної іонізації електронів, локалізованих на мілких донорах, при переході до σ_2 -проводності отримано як лінійні, так і нелінійні залежності поля ударної іонізації $E_{y\vartheta} = f(X)$ від тиску (і відповідно $E_{y\vartheta} = f(E_a)$) для різних рівнів легування в діапазоні $N_c < N_d < 3N_c$, де N_c критична концентрація переходу метал-ізолятор ПМІ.

Ми припускаємо, що лінійний характер функції $E_{y\vartheta} = f(E_a)$ можна пояснити малою відстанню між домішковими атомами в сильно легованих кристалах і малим значенням енергії активації в області σ_2 -проводності. Отримані значення E_a локалізованих станів дрібних донорів змінюються в межах від 1 до 3 мeВ як для n-Si ($X \parallel [111]$), так і для n-Ge ($X \parallel [001]$). Тому, незважаючи на те, що рухливість електронів у домішковій зоні менша порівняно з зоною провідності, рухливість вільних електронів, прискорених у домішковій зоні, може бути достатньо високою для отримання без розсіювання енергії, достатньої для ударної іонізації локалізованих станів на ізоляторній стороні, індукованого деформацією переходу МІ.

Нелінійний характер залежностей $E_{y\vartheta} = f(E_a)$ має місце при врахуванні будь-якого з механізмів розсіювання (на коливаннях гратки, домішкових атомах або інших структурних дефектах) прискорених іонізуючих електронів в процесі набору енергії необхідної для іонізації.

1. Ermakov V.N., Kolomoets V.V., Panasyuk L.I., and Rodionov V.E., 20th Internat. Conf. Phys. Semicond. (ICPS-20). v. 3, p.1803–1806 (1990).
2. P. I. Baranskii, V. V. Kolomoets, S. S. Korolyuk, Phys. Status Solidi (b). **116**, 2 (1983).
3. П. И. Баранский, В. В. Коломоец, А. В. Федосов, ФТП. **10**, 11 (1976).
4. Бир Г. Л. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках/ Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. – М. : Наука, 1972. – 584 с.

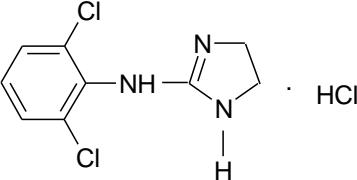
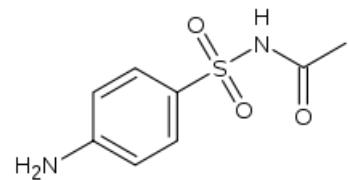
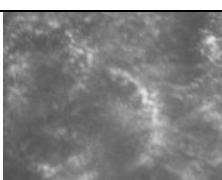
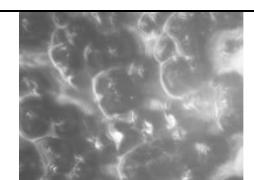
Morphology of films on a patterned silicon substrate from a two-component solution of heterocyclic amines

D.A. Kuznetsova, P.S. Smertenko, N.M. Roshchina, Y.M. Nasieka, S.V. Mamykin
V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Science of Ukraine, 41, Prospekt Nauky, 03028 Kyiv, Ukraine

The surface morphology of heterocyclic amine films deposited on patterned silicon substrates plays an important role in the efficiency of solar cells obtained on these films [1]. The best efficiency for such heterostructures was achieved with clonidine hydrochloride, which was of about 8.5 % [2]. The present work is devoted to the search for ways to increase the efficiency of organic-silicon heterostructures by improving the surface morphology due to different concentrations of two-component solutions of clonidine hydrochloride (CLO) and sodium sulfacyl (SS). In this work, the morphology of deposited organic films on patterned Si substrates is investigated as a function of deposition time. The organic two-component films were obtained by immersing the patterned Si substrates in a chemical bath with aqueous solutions of a mixture of CLO (3×10^{-3} w%) and SS (10w%) at room temperature under ambient laboratory conditions. The mixture solutions of CLO and SS were in the following proportions: 1:1, 1:2, 1:3, 1:5, 1:10, 2:1, 3:1, 5:1, 10:1, 1/2:1/2, 1/4:1/4. The deposition time was varied from 10 min up to 120 min. The surface morphology was recorded by the optical microscope MII-4 with the digital camera Olimpus.

The organic materials used are listed in the Table 1.

Table 1. Some information about chemicals used.

	Clonidine hydrochloride (CLO)	Sulfacyl sodium (SS)
Full chemical Name	<i>N</i> -(2,6-dichlorophenyl)-4,5-dihydro-1 <i>H</i> -imidazol-2-amine	sulfanilamide
Chemical formula	$C_9H_9Cl_2N_3$	$C_8H_{10}N_2O_3S$
Structural formula		
Morphology (deposition time is 40min)		

The results of morphology investigations are presented in Figs 1 and 2. These photos show the genesis of the surface morphology of the mixture of CLO-SS solutions at the different ratios of the components.

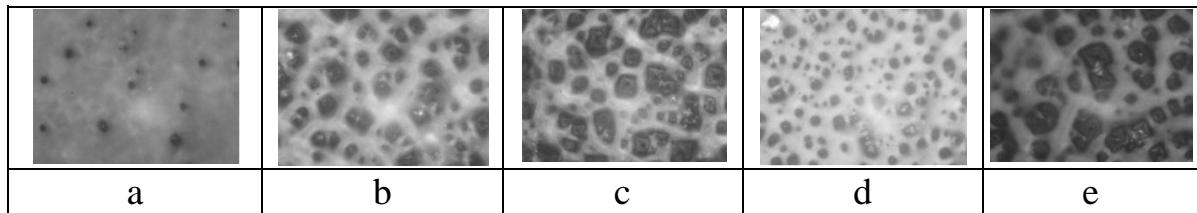


Fig. 1. The surface morphology of the mixture of CLO-SS solutions in the ratio of 1:1 (a), 1/2:1/2 (b), 1/4:1/4 (c); 2:1 (d) and 1:2 (e) at the deposition time of 40 min.

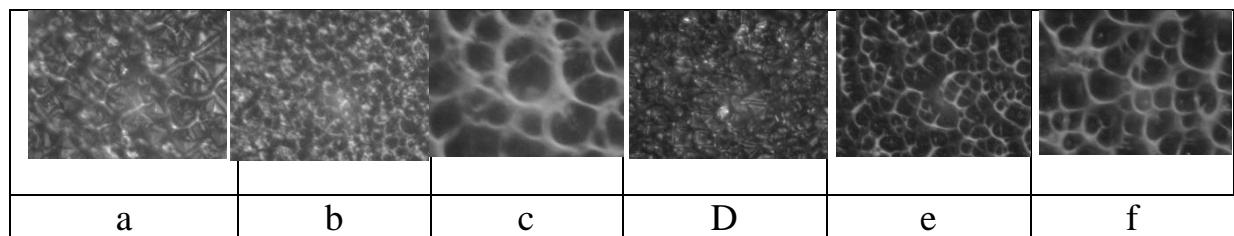


Fig. 2. Changes in surface morphology of a mixture of CLO-SS solutions in the ratio of 3:1 (a-c) and 1:3 (d-f). The time of the layer deposition: 40 min (a, d), 60 min (b, e) and 100 min (c, f).

In our case, the patterned silicon substrate provides centres for the self-organisation of organic films. Figs 1a-c show the effect of the concentration of the solutions at an equal solution ratio. Reducing the concentration from 1 to 0.25 changes the morphology of the film from almost solid, Fig. 1a, to mesh, Fig. 1c. Changing the ratio from 2:1 to 1:2 leads to a transition from a small-cell structure, Fig. 1d, to a large-cell structure, Fig. 1e. An increase in the SS concentration compared to CLO with a simultaneous increase in the self-organization time leads to the formation of a normal network-like morphology, Fig. 2f.

Thus, controlling the solution concentration, the ratio of two-component components, and the self-organization time allows to form the corresponding morphology and, consequently, properties. The work will continue with the study of the electro-physical properties of two-component self-organized films.

References

1. T.Ya. Gorbach, V.P.Kostylyov, P.S. Smertenko. Mol. Cryst. Liq.Cryst., 2011, Vol.535, pp.174-178. <https://doi.org/10.1080/15421406.2011.538332>
2. T.Ya. Gorbach, P. S. Smertenko, E.F.Venger. Ukrainian Physical Journal, 2014, v.59, N 6, p.601-611. <https://doi.org/10.15407/ujpe59.06.0601>.

Секція 2.
Фізичні явища
у низькорозмірних структурах

Section 2.
Physical phenomena
in low-dimensional structures

Особливості мас-спектрометричних досліджень нанорозмірних структур

**Дубіковський О., Антонін С., Мельник В., Оберемок О., Романюк Б.,
Пантелеєв О..**

*Інститут фізики напівпровідників ім В.Є.Лашкарьова НАНУ м. Київ, пр. Науки 41,
dubikovsky_o@ukr.net*

Іонно – зондова мас-спектрометрія дозволяє отримати характеристики елементного, ізотопного, фазового та молекулярного складу з високою чутливістю та локальністю. В якості основних методів дослідження нанорозмірних об'єктів ми використовували методи SNMS (мас-спектрометрія нейтральних пост-іонізованих часток), часо-пролітна (ToF-SIMS) та динамічна (Dynamic SIMS) мас-спектрометрія, як найбільш чутливі методи діагностики, що здатні отримувати інформацію про елементний склад нанометрових шарів та отримання достовірного просторового розподілу домішок з мінімізацією спотворення об'єкту, високою роздільною здатністю по глибині та високою локальністю. Кількісний аналіз в наших дослідженнях забезпечувався врахуванням матричних ефектів за допомогою використання еталонних зразків отриманих іонною імплантациєю. Разом з тим преваги методів забезпечуються низкою технічних рішень, які не можуть бути всі одночасно використані в одному приладі. Не дивлячись на це, деструктивна природа іонного розпилення змінює досліджуваний об'єкт та спотворює результати вимірювань внаслідок дії іонного переміщування, ефекту кратера, розвитку нанорельєфу, тощо. При зменшенні розмірів об'єкта до рівня наноструктур деструктивний вплив іонного зонду ще більш посилюється. Як наслідок виникає проблема відділити спотворення, які вносить метод аналізу іонами зонду в досліджуваний об'єкт від реального просторового розподілу концентрацій елементів при цілеспрямованих обробках наноструктур таких як іонна імплантация чи плазмові обробки.

Для вирішення цієї проблеми було обрано актуальні на сьогодні об'єкти досліджень: багатошарові періодичні наноструктури, надмілкі переходи та тонкі плівки переходів металів. Співставлення результатів мас-спектрометричних досліджень з високочутливими методами дослідження структурного стану (TEM/STEM, AFM, XRD) та визначення типу хімічного зв'язку методом XPS (для нестехіометричних матриць) дозволило проводити кількісний елементний аналіз. Тобто, був реалізований переход від порівняння відносної інтенсивності сигналу (певних елементів або структурних фаз) у вихідних та модифікованих структурах до концентраційних просторових розподілів елементів

Для наших досліджень методом молекулярно-променевої епітаксії було вирощено багатошарові періодичні структури GaN/AlGaN, які складалась з 21 періоду, з товщинами шарів 3 нм та– 5 нм, відповідно. Також було проведено дослідження багатошарових періодичних структур Mo/Si що містить 14 періодів загальною товщиною 304 ± 4 нм. Кожен період має товщину $21,7 \pm 0,3$ нм. На рис.1а показано розподіл домішок в багатошаровій структурі MoSi після іонного легування киснем (O^+).

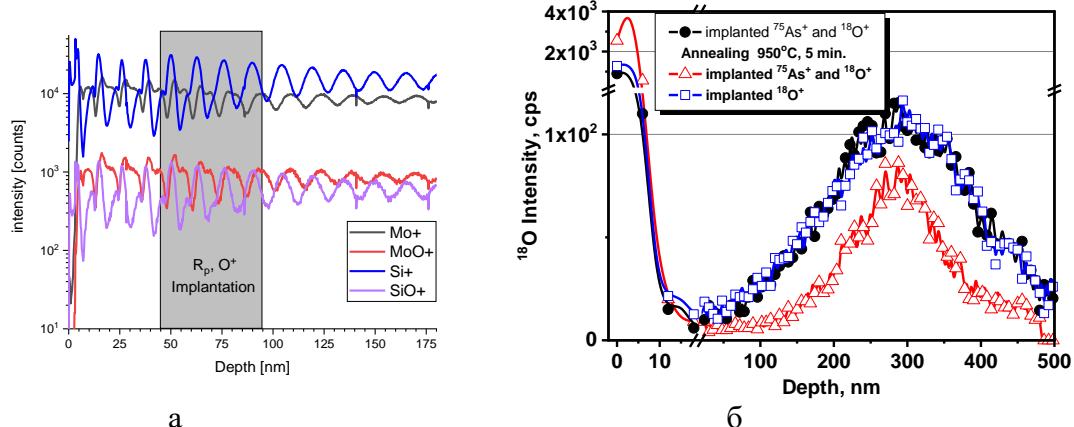


Рис.1 а) Розподіл домішок в напиленій багатошаровій структурі MoSi після іонного легування киснем (O^+) з енергією 80кеВ та дозою 50мкКл, та після термічної обробки 350° , 30хв. б) TOF – SIMS профілі розподілу імплантованого маркерного ізотопу кисню ^{18}O в нелегованому та легованих іонами арсену

Видно, що в області імплантації домішки кисню спостерігається покращення роздільної здатності по глибині та збільшення динамічної зміни інтенсивності сигналу аналізованих іонів. Цей ефект ймовірно пов'язаний зі збільшенням ймовірності іонізації домішок киснем, структури MoSi в процесі аналізу.

Нами були досліджені закономірності перерозподілу кисню в області формування n/p переходів при активації арсену (As) в Si. Для створення надмілких переходів, пластини а імплантувались іонами As енергією **5 кеВ** та дозою $4 \times 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Для здійснення модельних експериментів по впливу імплантованого As на перерозподіл кисню в кремнії при відпалах, частина зразків додатково імплантувалась ізотопами кисню $^{18}O^+$ (**100 keV, $1.2 \times 10^{14} \text{ см}^{-2}$**), що дозволило відділити власний кисень в пластині від імплантованого. На рис.1б показано TOF – SIMS профілі розподілу імплантованого маркерного ізотопу кисню ^{18}O в нелегованому та легованих іонами арсену зразку до та після активаційного відпала.

Було встановлено, що активаційний відпал імплантованого миш'яком кремнію призводить до перерозподілу імплантованого кисню в область розподілу As. Визначений коефіцієнт дифузії кисню в імплантованому іонами As кремнії виявився на порядок величини більшим порівняно з типовим коефіцієнтом дифузії кисню для цих температур.

Оптичні властивості гібридної системи «сферична металдіелектрична наночастинка – напівпровідникова квантова точка»

О.Ю. Бережний¹, Р.Ю. Корольков¹, А.В. Коротун^{1,2}

¹Національний університет «Запорізька політехніка», вул. Університетська 64, 69063 Запоріжжя, Україна

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

Гібридні наноструктури викликають науковий інтерес внаслідок спостережуваних в таких структурах унікальних оптичних ефектів, викликаних збудженням гібридних екситонів. Походження таких екситонів пов'язане з кулонівською взаємодією плазмонів та екситонів. Використання наночастинок із більш складною структурою та регульованими характеристиками (зокрема, оболонкових наночастинок) може ще більше підсилити оптичні ефекти, а також призвести до ще більш цікавих явищ. Так, правильний підбір розміру і матеріалу ядра забезпечує більш ефективне налаштування оптичних властивостей гібридної наносистеми. Крім того, не досліджувалося питання про вплив релаксації електронів у металевій нанооболонці на оптичні характеристики досліджуваної структури. Тому всі означені питання є вельми актуальними.

Важливими оптичними характеристиками гібридної системи «сферична металева нанооболонка – напівпровідникова квантова точка» є частота Рабі

$$\Omega = \frac{\mathcal{E}_0 \mu}{2hT_{\text{eff}}} \left(1 + \frac{S_{\text{pol}} \alpha_1^{\text{NL}} R_2^3}{R^3} \right) \quad (1)$$

та параметр підсилення електричного поля

$$\mathcal{G} = \frac{\mu^2}{4\pi h T_0 T_{\text{eff}} T_m} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(l+1)^2 \alpha_l^{\text{NL}} R_2^{2l+1}}{R^{2l+4}}, \quad (2)$$

де R – відстань від центру композитної наночастинки до квантової точки; R_2 – радіус всієї оболонкової частинки; S_{pol} – параметр, який залежить від напряму поляризації падаючого світла; \mathcal{E}_0 – напруженість поля падаючого світла; μ – дипольний момент дворівневої системи, якою моделюється квантова точка; T_m – діелектрична проникність оточуючого середовища;

$$T_{\text{eff}} = \frac{T_s^{\text{NL}} + 2T_m}{3T_m} \quad (3)$$

– ефективна діелектрична проникність; l – порядок мультипольності ($l=1$ – диполь); α_l^{NL} – нелокальна поляризовність мультипольності l

$$\alpha_l^{\text{NL}} = \left\{ \left(T_c + \frac{l+1}{l} T_s^{\text{NL}} \right) \left(T_s^{\text{NL}} - T_m \right) + \beta_c^{\frac{2l+1}{3}} \left(T_c - T_s^{\text{NL}} \right) \left(T_m + \frac{l+1}{l} T_s^{\text{NL}} \right) \right\} \times \\ \times \left\{ \left(T_s^{\text{NL}} + \frac{l+1}{l} T_m \right) \left(T_c + \frac{l+1}{l} T_s^{\text{NL}} \right) + \frac{l+1}{l} \beta_c^{\frac{2l+1}{3}} \left(T_s^{\text{NL}} - T_m \right) \left(T_c - T_s^{\text{NL}} \right) \right\}^{-1}, \quad (4)$$

$\beta_c = (R_1/R_2)^3$, R_1 – радіус ядра наночастинки; T_c – проникність діелектричного ядра, а нелокальна діелектрична проникність метала оболонки

$$T_s^{\text{NL}}(\omega, \beta_c, R_2) = \left\{ \frac{2}{\pi} (2l+1) \beta_c^{\frac{l}{3}} R_2 \int_0^\infty \frac{j_l(kR_1) j_l(kR_2)}{T_s(k, \omega)} dk \right\}^{-1}. \quad (5)$$

У формулі (5) $j_l(x)$ – сферична функція Бесселя порядку l ; $T_s(k, \omega)$ – діелектрична функція металу оболонки з урахуванням просторової дисперсії, яка залежить від ефективної швидкості релаксації електронів у металевій оболонці.

Результати розрахунків в рамках запропонованої моделі показали наявність додаткового уширення спектральних ліній $\alpha_l^{\text{NL}}(\omega)$ (а, відповідно і $\Omega(\omega)$, $\mathcal{G}(\omega)$) за рахунок релаксації електронів у металевій оболонці.

Електронна структура SiTe₂

Д. І. Блецкан, В. В. Вакульчак, А. І. Гапак

Ужгородський національний університет, вул. Волошина, 54, Ужгород, 88000,

e-mail: dmytro.bletskan@uzhnu.edu.ua

Дителурид кремнію (SiTe₂) належить до родини шаруватих кристалів типу A^{IV}B^{VI}₂. Підвищений інтерес до шаруватих кристалів SiTe₂ викликаний створенням на їх основі інтерференційних фільтрів [1]. Дителурид кремнію кристалізується в тригональній структурі типу CdI₂ з параметрами гратки $a = 4.2858 \text{ \AA}$, $c = 6.7286 \text{ \AA}$, $\gamma = 120^\circ$ [2]. Симетрія кристалічної гратки SiTe₂ описується просторовою групою $P\bar{3}m1$. У структурі SiTe₂ чотиривалентний кремній (Si⁴⁺) шестикратно координований атомами телуру (Te²⁻). Найближчими сусідами атома кремнію є шість атомів телуру, які розташовані у вершинах октаедра [SiTe₆]. Октаедри [SiTe₆], зв'язані між собою спільними ребрами, формують тришарові пакети «сандвічі» Te–Si–Te, паралельні площині (001).

Електронна структура кристала SiTe₂, розрахована методом DFT з використанням гібридного функціоналу HSE06 в зоні Бріллюена гексагональної гратки, наведена на рис. 1, a. Початок відліку енергії співпадає з вершиною валентної зони. За результатами розрахунку дителурид кремнію є непрямозонним напівпровідником з вершиною валентної зони в напрямку Г–К і дном зони провідності в напрямку M–L зони Бріллюена й розрахованою шириною забороненої зони $E_{gi} = 1.2 \text{ eV}$.

Шаруватий характер кристала SiTe₂ знаходить своє відображення у структурі енергетичного спектра. Спостерігається значна анізотропія дисперсії для окремих енергетичних зон вздовж і поперек тришарових пакетів. Так, у напрямку Г→M та Г→K (вздовж тришарового пакету) дисперсія більшості верхніх валентних зон перевищує дисперсію у напрямку Г→A (поперек шарів).

У валентній зоні SiTe₂, загальною шириною 11.77 eV, наявні вісім заповнених енергетичних зон, які утворюють три зв'язки зон. Інформацію про внески атомних орбіталей у кристалічні стани SiTe₂ дають розрахунки повної локальних парціальних густин електронних станів, наведених на рис. 1, b. У валентній зоні дителуриду кремнію переважають парціальні 5s- і 5p-стани телуру, причому їх енергетичні положення істотно різняться. Зони, з переважаючими внесками станів телуру, можна розділити на три типи. Нижня зв'язка з двох енергетичних зон, що формує дно валентної зони в енергетичному інтервалі від -11.77 eV до -10.27 eV, утворена переважно 5s-станами телуру з незначним домішуванням 3s- і 3p-станів кремнію. Вище неї на відстані 3.12 eV розташована сильно дисперсна відокремлена зона, утворена гібридизованими Te5p, 5s- Si3s-станами. Верхня зв'язка з п'яти заповнених енергетичних зон шириною 4.15 eV має змішаний характер за участю гібридизованих 5p-станів телуру і 3p-станів кремнію. Верхня частина цієї заповненої зони, шириною 1.5 eV, має переважно аніонний характер, і p_z-стани телуру формують її вершину в напрямку Г–К. Характерною особливістю електронної структури кристала SiTe₂ є наявність нижньої незайнятої зони, відокремленої забороненим енергетичним інтервалом (1.33 eV) від наступних незайнятих зон. Ця

ізольована незайннята зона має суттєву дисперсію і містить внески вільних Te p - і Si s -станів.

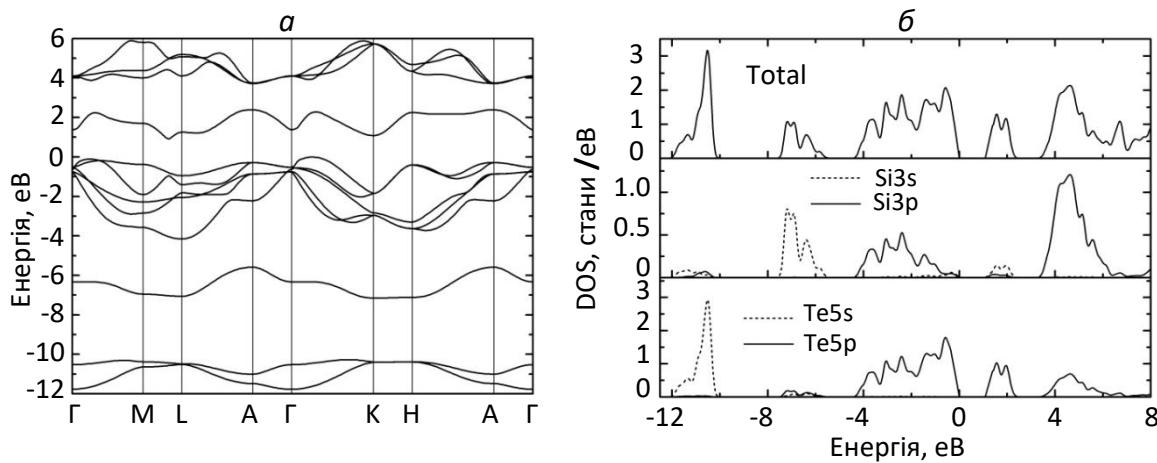


Рис. 1. Зонна структура (а), повна та парціальні густини електронних станів (б) SiTe₂.

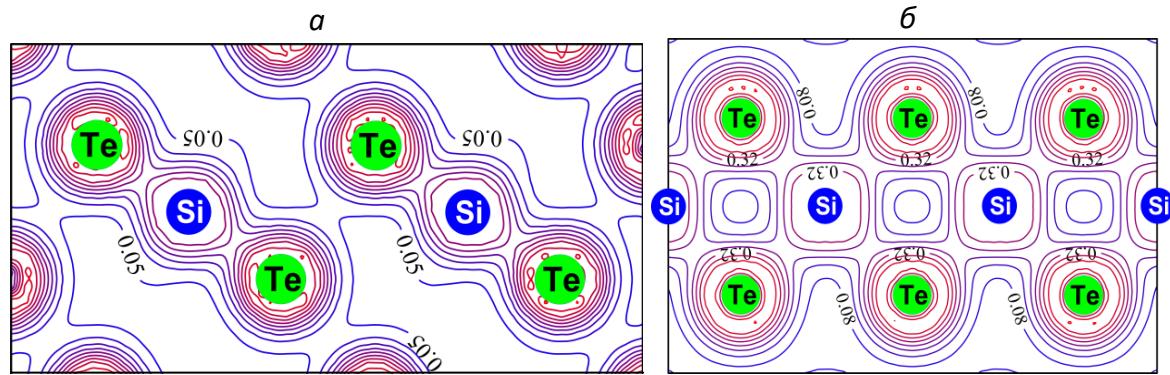


Рис. 2. Карти просторового розподілу електронної густини в площині (110) (а),
(101) (б) SiTe₂.

Двовимірні карти густини електронного заряду для двох кристало-графічних площин (110) і (101) приведені на рис. 2, а, б. На рис. 2 видно, що електронна густина всередині «сендвіча» Te–Si–Te, яка відображає хімічний зв'язок атомів кремнію з біжніми сусідами Te, значно вища, ніж на його границях. Розподіл заряду в одному тришаровому пакеті утворює практично замкнуту оболонку, що вказує на слабку міжпакетну ван-дер-ваальсову взаємодію, обумовлену p_z -станами телуру, що частково входять у міжшаровий простір.

- [1] Doni-Caranicola E.G., Lambros A.P. // J. Opt. Soc. Am. **73**, 383 (1983).
- [2] Mishra R., Mishra P.K., Phapale S., Babu P.D., Sastry P.U., Ravikumar G., Yadav A.K. // J. Solid State Chem. **237**, 234 (2016).

Вплив електричного поля на синтез та сенсорні властивості біонанокомплексів квантова точка – HSA

Даньків О.О., Кузик О.В., Столярчук І.Д., Столярчук А.І., Стецко В.М.

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, Дрогобич

Квантові точки (КТ) CdTe є предметом різноманітних досліджень завдяки високому квантовому виходу та яскравості, широкій смузі поглинання й вузькій лінії випромінювання, тривалій флуоресценції та високій фотостабільноті, що робить їх придатними для різних цілей, таких як протизапальні, ранозагоювальні, антиоксидантні, протигрибкові та антибактеріальні засоби. На теперішній час використання КТ, що містять кадмій, має суттєвий недолік, який пов’язаний з його токсичністю. Але нещодавні дослідження демонструють різке зменшення токсичності КТ та зростання проникності у випадку взаємодії з білками, зокрема, альбуміном крові людини. На сучасному етапі розвитку нанобіотехнологій синтез гібридних біонанокомплексів, що поєднують неорганічніnanoструктурі з біомолекулами, привертає значну увагу завдяки їх унікальним фізико-хімічним властивостям. Одними з найбільш перспективних є комплекси на основі квантових точок – напівпровідниковых нанокристалів, які володіють розмірно-залежною фотолюмінесценцією, високою фотостабільністю та широкими можливостями для функціоналізації. Зокрема, біонанокомплекси КТ CdTe з сироватковим альбуміном людини (HSA) розглядаються як потенційні системи для флуоресцентного маркування клітин, доставки лікарських препаратів та створення біосенсорів. Однак, формування стабільних і функціонально активних біонанокомплексів CdTe–HSA є складним процесом, який значною мірою залежить від умов синтезу, таких як pH середовища, температура, концентрації реагентів. Взаємодія біонанокомплексів із біологічними об’єктами через виникнення механічних напружень призводить до погіршення їхніх спектральних характеристик [1] та обмеження використання кон’югатів КТ-білок *in vivo*. Дослідження впливу зовнішніх полів, зокрема електричного, на формування таких комплексів дозволяє керувати їх структурою та функціональними властивостями.

У цій роботі досліджено механізми взаємодії між КТ і HSA та впливу електричного поля на процес синтезу й стабілізації біонанокомплексів CdTe–HSA, їхню морфологію, оптичні властивості.

Серед основних взаємодій, пов’язаних з адсорбцією протеїнів, виділяють гідрофобну силу, силу Ван-дер-Ваальса та водневий зв’язок [2]. Проте основний механізм зв’язування – електростатична взаємодія,

що пов'язано з великим дипольним моментом молекули альбуміну. Тому можна припустити, що під впливом зовнішнього (чи вбудованого внутрішнього) електричного поля можна здійснювати контролюваний процес формування біонанокомплексів КТ–HSA.

На основі методу самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку досліджено роль електрон-деформаційної взаємодії в КТ CdTe при формуванні біонанокомплексу КТ–HSA при дії зовнішнього електричного поля. Встановлено закономірності зміни зонної структури біонанокомплексу КТ з HSA при зміні їх геометричних розмірів.

Електричне поле сприяє орієнтації білкових молекул HSA у напрямку силових ліній поля. Це, своєю чергою, призводить до збільшення поверхневої концентрації альбуміну на поверхні КТ, зменшуючи випадковість взаємодії та підвищуючи структурну однорідність комплексів.

Під дією електричного поля спостерігається зниження бар'єра для електростатичного приєднання HSA до поверхні CdTe, що проявляється у збільшенні константи зв'язування та зменшенні середнього гідродинамічного розміру біонанокомплексів. При наявності електричного поля спостерігається зменшення ступеня агрегації наночастинок завдяки стабілізації заряду на поверхні та утворення дрібніших стабільніших наночастинок із прогнозованими параметрами. Це призводить до того, що наявність електричного поля призводить до збільшення інтенсивності фотолюмінесценції біонанокомплексу, компенсуючи її зменшення за рахунок гасника.

Очікується, що внаслідок збільшення ентропії при дії електричного поля у процесі формування біонанокомплексів КТ CdTe–HSA зросте стабільність їх сигналу в біологічних середовищах та чутливість до аналізованих об'єктів. Це пов'язано з тим, що більш компактна та симетрична оболонка “білкової корони” може зменшити фонові флюктуації сигналу. Окрім зовнішнього поля, керування процесом утворення біонанокомплексу КТ–HSA можна здійснювати вбудованим електричним полем. Наприклад, наявність оболонки у КТ призводить до просторового перерозподілу заряду і виникнення електричного поля, яке впливатиме на процес формування “білкової корони”.

1. Kunachowicz D., Ściskalska M., Jakubek M., Kizek R., Kepinska M. Structural changes in selected human proteins induced by exposure to quantum dots, their biological relevance and possible biomedical applications // NanoImpact. – 2022. – V. 26. – P. 100405.
2. Lai L., Lin C., Xu Z-Q., Han H-L. Spectroscopic studies on the interactions between CdTe quantum dots coated with different ligands and human serum albumin // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. – 2012. – V. 97. – P. 366.

Resonant Impurity States and Wave Functions in Quantum Wells

Roman Demediuk¹, Volodymyr Akimov^{2,3}, Viktor Tulupenko^{3,4}, Anton Tiutiunnyk⁵, Oksana Fomina⁴, Carlos A. Duque³, Alvaro L. Morales³, David Laroze⁶, Miguel Eduardo Mora-Ramos⁷, Olha Miezentseva¹.

1 Mathematics, physics and computer science department, Donbas State Pedagogical University, Sloviansk, Ukraine

2 Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Medellín, Medellín, Colombia

3 Grupo de Materia Condensada-UdeA, Instituto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia UdeA, Medellín, Colombia

4 Physics department, Donbas State Engineering Academy, Kramatorsk, Ukraine

5 Departamento de Física, FACI, Universidad de Tarapacá, Casilla 7D, Arica, Chile

6 Instituto de Alta Investigación, Universidad de Tarapacá, Casilla 7D, Arica, Chile

7 Centro de Investigación en Ciencias-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, CP 62209, Cuernavaca, México

Mathematically, impurity states can be viewed as perturbations of the conduction (or valence) band energy continuum by the impurity Coulomb potential. If the impurity is located in or near a quantum well (QW), all QW subbands are perturbed, and some states associated with the upper energy subbands may appear against the continuous energy spectrum of the lower subbands. Such impurity states are called resonant (following Fano resonance [1]).

Here we report the results of the calculation and analysis of the wave functions and energy positions of the first 18 impurity states, including 9 resonant and 9 non-resonant, in GaAs QWs with different well widths and impurity positions. Our calculation method is based on the axial symmetry and the decomposition of the impurity wave functions into subband wave functions. It is described in detail in [2] and is based on the mathematical model first proposed in [3].

We have shown that in all cases the impurity binding energy (the energy distance between the impurity state and the corresponding subband) has a maximum(s) for the impurity located near the well center and decreases monotonically as the impurity moves away.

The binding energies of the impurity states follow qualitatively (but not quantitatively) the general rule for the energy levels of the Rydberg series, making the first resonant and first non-resonant states the most prominent. The other calculated states exhibit similar behavior. Typically, in wider wells the absolute variation of the binding energies is larger, but the relative variation is smaller.

The wave functions for a centrally located impurity are symmetric for non-resonant states and antisymmetric for resonant states. When the impurity is displaced from the center of the QW, the central symmetry is broken. The wave function magnitudes are most asymmetric for the impurity position near the midpoint from the center to the barrier (see Fig. 1). As a result of this asymmetry,

the non-resonant wave functions follow the impurity center, while the resonant wave functions move their center of mass in the opposite direction into the QW.

If the impurity is outside the well, in the barrier, its wave functions remain in the well and restore symmetry with respect to the QW center, while their localization in the QW plane decreases, which reduces the binding energy. Within large distances from the well center, the binding energy is zero and the impurity states become identical to the states of the corresponding subband. It is worth noting that the impurity states in the bulk differ because they are perturbations of the 3D continuum, not subbands.

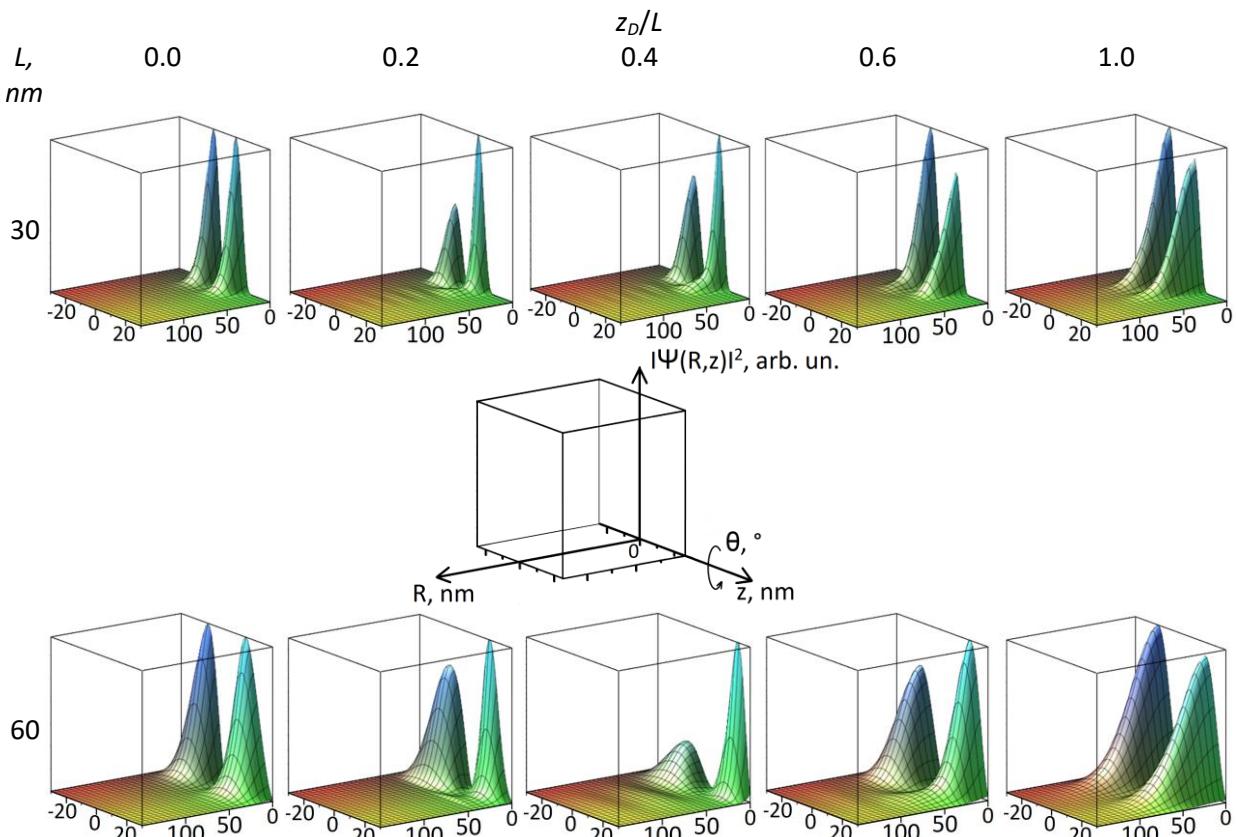


Figure 1. R-z plots of the squared magnitudes of the first resonant impurity wave functions for different impurity positions z_D . Well width $L=30$ nm for the upper row and, and $L=60$ nm -for the lower row.

References:

1. Fano, U., Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts. Phys. Rev. 124, 1866 (1961) (doi: 10.1103/PhysRev.124.1866)
2. Akimov, V., Tulupenko, V., Demediuk, R. et al. Numerical proceeding to calculate impurity states in 2D semiconductor heterostructures. Sci Rep 14, 30810 (2024). <https://doi.org/10.1038/s41598-024-81346-6>
3. Vinter, B., Influence of charged impurities on Si inversion-layer electrons. Phys. Rev. B, 26, 6808, (1982) (doi: 10.1103/PhysRevB.26.6808)

Квантова ефективність фотодетекторів із впровадженими в напівпровідникову матрицю плазмонними наночастинками

Д.В. Дем'яненко¹, В.І. Рева¹, А.В. Коротун^{1,2}

¹Національний університет «Запорізька політехніка», вул. Університетська 64,
69063 Запоріжжя, Україна

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

Як відомо, одним із найважливіших класів приладів для реєстрації електромагнітного випромінювання різних частотних діапазонів є фотодетектори. В останні роки для підвищення ефективності роботи фотодетекторів в їх напівпровідникову матрицю впроваджують металеві наночастинки. При цьому має місце збільшення відбору світла за рахунок підсилення локальних електричних полів або прямого перетворення поглинених фотонів в електричну енергію за рахунок перенесення гарячих носіїв заряду (електронів або дірок) від плазмонних наночастинок до напівпровідниковых рецепторів. Тому задача про визначення впливу плазмонних ефектів у металевих наночастинках на фізико-технічні характеристики фотодетекторів є актуальною.

Важливою характеристикою фотодетекторів є їх квантова ефективність [1]. Потрібно відзначити, що існують два принципово різних випадки конструкції фотодетекторів, для яких співвідношення для визначення квантової ефективності є різними. Так, у випадку коли товщина напівпровідникового шару порядку радіуса наночастинок (тонкоплівкові фотодетектори), квантова ефективність визначається виразом

$$\eta = \frac{h\omega - e\varphi_B}{h\omega}, \quad (1)$$

де φ_B – висота бар’єра Шотткі на межі метал / напівпровідник; ω – частота електромагнітного випромінювання, що реєструє фотодетектор.

У випадку, коли товщина напівпровідникового шару суттєво перевищує радіус наночастинки, квантова ефективність визначається формулою

$$\eta = \frac{A}{8\varepsilon_F} \frac{(h\omega - e\varphi_B)^2}{h\omega}, \quad (2)$$

де ε_F – енергія Фермі, а коефіцієнт поглинання при $\gamma_{eff} = \omega = \omega_p$ (тобто в робочій області фотодетекторів – біжній інфрачервоній і видимій областях) визначається адитивним внеском об’ємної й поверхневої релаксації та радіаційного загасання [2]

$$\gamma_{eff} = \gamma_{bulk} + \frac{\mathcal{K}}{\omega^2}, \quad (3)$$

де $\gamma_{bulk} = \text{const}$ для конкретного металу,

$$\mathcal{W} = \frac{1}{4} \omega_p^2 \frac{v_F}{R} \left[1 + \frac{V}{6\pi\sqrt{T_m(T^\infty + 2T_m)}} \left(\frac{\omega_p}{c} \right)^3 \right], \quad (4)$$

c – швидкість світла; v_F – фермівська швидкість електронів; R і V – радіус і об'єм наночастинки; ϵ_m – діелектрична проникність напівпровідникового середовища; T^∞ – внесок кристалічної ґратки в діелектричну функцію металу; ω_p – плазмова частота.

Розрахунки квантової ефективності фотодетекторів проводилися для наночастинок різних плазмонних металів у кремнієвих тонкоплівковій і товстоплівковій матрицях. Показано, що у випадку тонкоплівкових фотодетекторів квантова ефективність неперервно зростає зі збільшенням частоти, в той час як для товстоплівкових фотодетекторів квантова ефективність має мінімум у близькій інфрачервоній і максимум в оптичній областях спектра. Таким чином, визначено спектральні інтервали, в яких для реєстрації електромагнітного випромінювання доцільно використовувати розглянуті типи фотодекторів.

1. C. Scales, P. Berini. *IEEE J. Quant. Electron.* **46**, 633 (2010).
2. A.V. Korotun, H.V. Moroz, R.Yu. Korolkov. *Funct. Mater.* **31**, 119 (2024).

Використання поверхнево плазмоного резонансу в лавинних кремнієвих фотодіодах

Коротєєв В.В. Романюк Б., Сапон С., Кульбачинський, Мельник В. Максименко З., Дубіковський О.

Інститут фізики напівпровідників ім В.Є.Лашкарьова НАНУ м.Київ, пр.Науки 41

Кремнієвий лавинний фотодіод (ЛФД) є ключовим елементом виявлення слабких оптических сигналів ближнього інфрачервоного ІЧ діапазону спектру для швидкодіючих систем реєстрації випромінювання та лазерного визначення відстані до сканованого об'єкту. Використання лавинних діодів дозволяє на порядки величин підвищити чутливість і, відповідно, величину і точність визначення відстані до об'єктів. Для аналізу основних електрических характеристик лавинного діода нами було розроблена теоретична модель, яка була застосована для визначення основних параметрів та профілів легування лавинного діода на основі Si. У розрахунках використовували такі параметри: $p^- = 2 \times 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $L_b = 380 \text{ мкм}$, $m_c = 6 \times 0,36m_e$ (тут m_e – маса вільного електрона, коефіцієнт 6 враховує кількість долин), $m_v = 0,81m_e$, $\epsilon_g = 1,1 \text{ eV}$, $\kappa_0 = 11,7$ і $\mu_{n(p)} = 1000$ (500) $\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{s}$

На рисунку 1а показано поперечний переріз виготовленого кремнієвого ЛПД на платформі КМОН технології. Видно, що розроблена конструкція складається з класичного набору електроактивних n+-p-p+-π-p областей. Для формування n+-шару було використано високодозову імплантацію іонів арсену ($E = 60 \text{ кeV}$, $D = 6.25 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$) в імплантовану бором ($E = 800 \text{ кeV}$, $D = 3.1 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$) високоомну пластину Si (111) з наступними термічними обробками при температурі 1000°C 120сек в атмосфері N_2 .

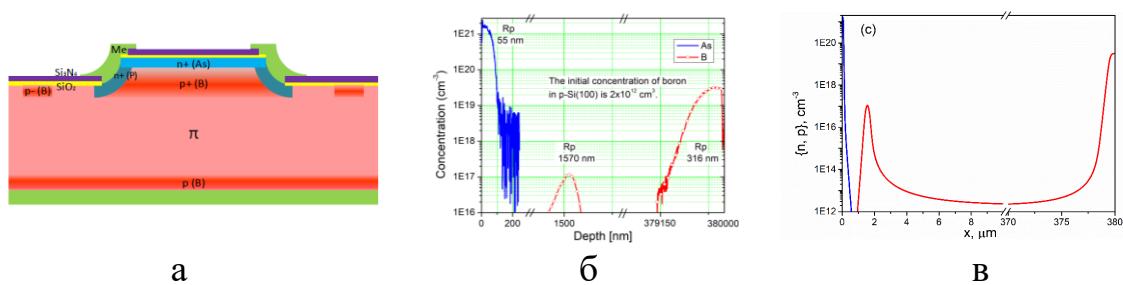


Рис.1. а) поперечний переріз виготовленого ЛПД; б) SIMS- профілі розподілу легуючих домішок; в) розрахований розподіл електронів (синя крива) та дірок (червона крива) по товщині пластини .

Для покращення фотодетекції нами було використано явище поверхневого плазмонного резонансу. Підхід ґрунтуються на збудженні локальних плазмонів в 1D (одно-періодичній) металічній гратці (Рис.2а). Таке покриття дозволяє збільшити ефективне поглинання падаючого

випромінювання в бажаній області фотодіоду, завдяки резонансному збудженню поверхневих плазмон-поляритонів та ефектів близького поля.

У випадку збудження плазмонного резонансу інтенсивність близького поля збільшується на порядок величини. Відповідно, середнє поглинання в активному шарі також збільшується. Важливо, щоб частота локалізованого граткового плазмона лежала за краєм фундаментального поглинання. З результатів моделювання, приведених на Рис.2б, бачимо, що ефективність поглинання по всій глибині платівки збільшилась на 1,6% тоді як в приповерхневій області поглинання структури із граткою не вийшло за межу структури з антивідбиваючим покриттям. Такий несуттєвий приріст може пояснюватись великою площею затінення, тому, ми вирішили нанести на поверхню наших структур наночастинки золота.

Перед нанесенням наночастинок на серії виготовлених лавинних фотодіодів йонним пучком протравлювалось оптичне вікно до активної області катоду. Далі золь-гель методом на поверхню сформованого ЛФД наносились наночастинки золота. Концентрація наночастинок становила величину ($1,5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$), а їх середній розмір був $\sim 17 \text{ нм}$.

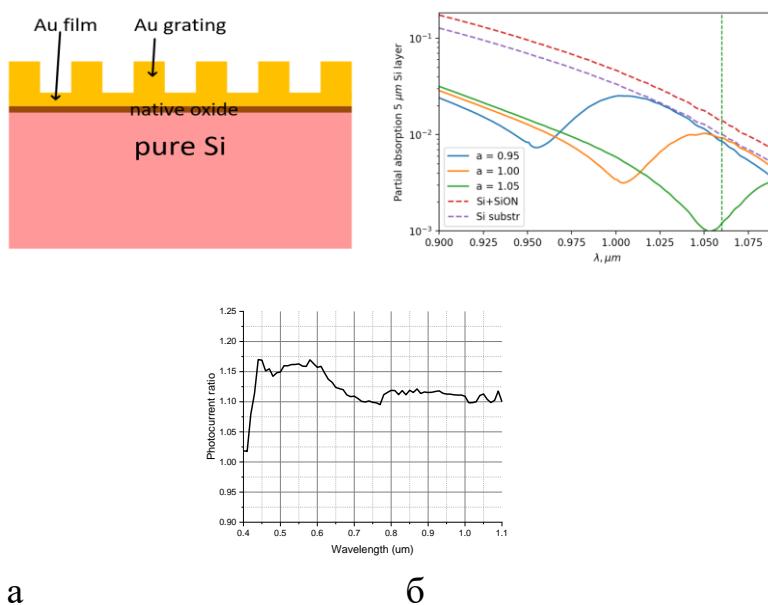


Рис.2 а) Структура поверхневої металічної гратки б) залежності поглинання випромінювання в приповерхневій області 5 мкм від періоду гратки, в) графік залежності співвідношення фотоструму після та до осадження наночастинок від довжини хвилі.

На Рис. 2а приведені результати вимірювання спектральних характеристик вихідних ЛФД та з нанокластерами золота. З графіків на рисунку 2б бачимо, що осадження наночастинок збільшило чутливість на $>10\%$ в діапазоні довжин хвиль від 0.9 до 1.1 мкм. Слід відмітити, що

змінюючи архітектуру граток або геометричні розміри наночастинок можна ефективно змінювати резонансні частоти поверхневих (локалізованих) плазмонів й геометрію близького поля для колімації поглинання в активну область p-n переходів. Це може бути ефективно використано для створення спектрально селективних приймачів близького ІК.

Negative capacitance effect in the structures with nanocomposite films

Evtukh A.A.^{1,2}, Antonin S.V.¹, Muryi Ya.Yu.¹, Pylypov A.I.², Kizjak A.Yu.¹,
Pylypova O.V.², Bratus O.L.¹

¹*V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 41 Pr. Nauky, Kyiv
03028, Ukraine.*

²*Educational and Scientific Institute of High Technologies, Taras Shevchenko National
University of Kyiv, Volodymyrska Street, 64, Kyiv 01601, Ukraine*

The negative capacitance is observed in some structures and devices. Among them are (i) forward biased rectifying devices, (ii) two-dimensional electron/hole gases and (iii) metal-insulator semiconductor (MIS) or metal-insulator-metal (MIM) structures [1]. The negative capacitance has been revealed in the structures with such materials as thin films including ferroelectrics, amorphous chalcogenides, binary oxides, organic/inorganic composites, alloys etc. The many models have been proposed to understand this effect. The explanation in many cases depends on the structure under investigation. If we consider the MIS structure, the negative capacitance is determined by peculiarities of insulator polarization, localization of the charge in trap/interface electron states and contact injection.

Negative capacitance structures are very attractive for applications in modern micro- and nanoelectronics. On the one hand, they can be used as the film inductors in high-frequency integrated circuits, increasing their packing density. On the other hand, they can be used in multilayer gate dielectrics, reducing the power consumption of transistors.

In this work the revealing of negative capacitance effect in MIS structures with nanocomposite $\text{SiO}_x(\text{Si})\&\text{Fe}_y\text{O}_x(\text{Fe})$ and Fe_yO_x films are described.

The nanocomposite films were obtained by ion-plasma sputtering technique. The combine Si+Fe or Fe targets were sputtered in O_2+Ar atmosphere. The thicknesses of the films were 55 nm and 46 nm respectively. The capacitance - voltage ($C-U$) characteristics were measured by Agilent 4294A semiconductor parameter analyzer in the frequency range of the testing signal 10 Hz – 5 MHz. The amplitude of testing signal was 20 mV.

Structure with nanocomposite $\text{SiO}_x(\text{Si})\&\text{Fe}_y\text{O}_x(\text{Fe})$ film. The films after deposition were annealed at $T=1100$ C in nitrogen. The silicon nanocrystals are formed in the silicon enriched $\text{SiO}_x(\text{Si})\&\text{Fe}_y\text{O}_x(\text{Fe})$ film during high temperature annealing. It was observed that the conductivity is practically independent on the frequency up to ~20 kHz. Starting with the frequency more than ~20 kHz and up to ~ 5 MHz, the power dependence of the conductivity $G \sim f^m$, where $m \simeq 0.49 - 0.52$ is observed. The obtained value m

is close to the prediction of the well-known Mott's model of the hopping alternating current conductivity, which gives $m \approx 0.8$.

The capacitance on the frequency of the alternating signal dependences is significant. In addition, there is the significant nonlinearity capacity on the frequency in the range of 10 Hz - 5 MHz.

The inductance on voltage dependences with the frequency as the parameter demonstrate the significant dependence on the frequency, especially in the low frequency region. The inductance slight change in the low frequency region (to the frequency of ~ 20 kHz), and then it decreases. Based on the obtained results it is possible to evaluate which type of imagine part of the impedance (capacitive or inductive) dominates. The reactive resistance includes inductive and capacitive parts. The inductive component of the reactive resistance is observed till frequency of 1 MHz in the structures with $\text{SiO}_2(\text{Si})\&\text{Fe}_x\text{O}_y(\text{Fe})$ film, then the capacitive component dominates.

Structure with nanocomposite Fe_yO_x film. The capacitance-voltage characteristics of the structure with nanocomposite Fe_yO_x film are presented in Fig.1. As can be seen in Fig.1, at the beginning the capacitance increase with the voltage growth and then decrease. In higher voltage region the capacitance is negative. The transition to negative capacitance in case of lower frequencies begins at lower voltages.

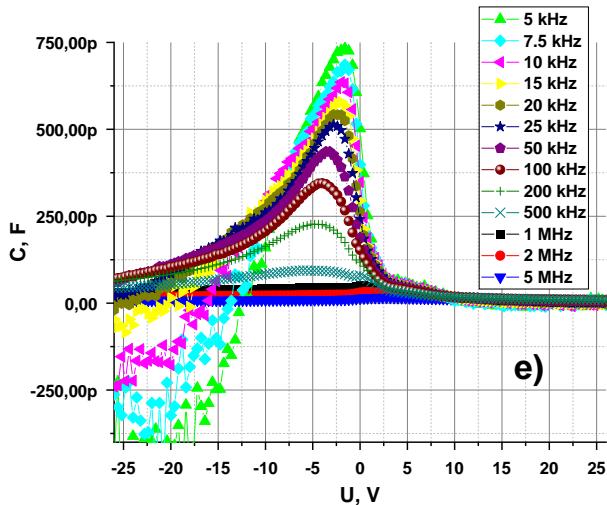


Fig. 1. C-U characteristics of the structure with nanocomposite Fe_yO_x film with the frequency as parameter.

The physical model for explanation of negative capacitance effect has been proposed. It based on the peculiarities of nanocomposite films polarizations with taking into account as Maxwellian displacement current and the conduction current.

1. A. F. Roudsari, I. Khodadad, S. S. Saini, and M. P. Anantram. Photon induced negative capacitance in metal oxide semiconductor structures. *IEEE Tran. Nanotechnology*. 2016. P. 1 - 5. <http://ieeexplore.ieee.org/Xplore>.

Peculiarities of spontaneous and stimulated UV photoluminescence in micro/nanocrystalline ZnO powders

L.L. Fedorenko¹, I.A. Izmailov¹, V.V. Naumov¹, V.O. Yukhymchuk¹, A. Medvids²

¹V.E.Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 03028 Kyiv, Ukraine

²Institute of Technical Physics, Riga Technical University, LV-1048 Riga, Latvia

Zinc oxide (ZnO) is one of the best known photoactive wide-bandgap *n*-type metal-oxide semiconductor materials whose unique optical and electronic properties are of great interest for modern photonics and optoelectronics [1, 2]. In particular, photoexcited ZnO nanoparticles (NPs) exhibit strong UV excitonic photoluminescence (PL) at room temperature (RT) at low excitation threshold [3]. But despite all the advances in applications, some features of RT excitonic PL of ZnO NPs are not so clear, especially in disordered micro- and nanostructured systems with random light scattering. Here we tried to study this issue in more detail for micro- and nanocrystalline ZnO powders.

The experiments were carried out with fine-dispersed ZnO powder of high-grade quality obtained by a hydrothermal method and characterized by XRD, SEM, Raman, UV-Vis and PL methods. The measurements showed that the randomly oriented crystalline ZnO NPs had a nodular shape with sizes from 100 nm to 1 μ m and crystallites of \sim 20 nm. The optical bandgap was close to \sim 3.3 eV. The samples for PL studies were prepared as a \sim 100 μ m thick 2D powder layer packed between thin quartz plates. In the PL spectra excited in ZnO powder by a short-pulsed N₂ laser at a wavelength of 337 nm, we observed a nonlinear amplification of the near-band-edge (NBE) excitonic PL emission in the UV region at a wavelength of 387 nm and an attenuation of the broad deep-level (DL) PL emission in the visible (green-orange) region at a wavelength of 500 nm. A superlinear increase in the peak intensity of the NBE PL band and its FWHM narrowing simultaneously with a decrease (up to disappearance) of the weak DL PL band during the increase in the excitation power clearly indicates stimulated emission of ZnO NPs in the powder medium. This regime is realized in the entire excitation range due to the non-resonant diffusion mode of light amplification, similar to random laser generation in multiple scattering photonic media of Letokhov type [2]. The emission spectra varied with the observation angle from sample to sample, but the transition from spontaneous to stimulated emission in the samples could be observed in all directions. According to theoretical estimates, the critical size for random lasing in the 2D powder with ZnO NPs is sufficient. The estimated UV gain is high as \sim 100 cm⁻¹, the threshold power is low as \sim 1 mJ/cm². The results look promising. Research is in progress.

[1] Tashiro A., Adachi Y., Uchino T., *J. Appl. Phys.* **133**, 221101 (2023).

[2] Cao H., Eliezer Y., *Appl. Phys. Rev.* **9**, 011309 (2022).

[3] Lytovchenko V.G. et al., *Ukr. J. Phys.* **66**, 612-617 (2021).

Ефект акумуляції заряду та зміни провідності в $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ наночастинках

Юлія М. Гуденко¹, Олександр С. Пилипчук¹, Віктор В. Вайнберг¹, Віктор І. Стъопкін¹, Ігор В. Фесич², Юрій О. Загородній³, Леся П. Юрченко³, Анна О. Дяченко⁴, Михайло П. Трубіцин^{4,5} та Володимир М. Порошин¹

¹Інститут фізики НАН України, 46, пр. Науки, 03028 Київ, Україна

²Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01030 Київ, Україна

³Інститут проблем матеріалознавства ім. Францевича НАН України, 3, вул.

Омеляна Прицака, 03142 Київ, Україна

⁴Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, 72 проспект Науки, , 49000 Дніпро, Україна

⁵Інститут фізики Чеської академії наук, 1999/2, 182 00 Прага 8, Чеська Республіка

Наноматеріали $\text{Hf}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_2$ завдяки здатності накопичення заряду є перспективними матеріалами для створення елементів пам'яті та польових транзисторів.

У роботі експериментально показано відтворюване резистивне перемикання та накопичення заряду в нанопорошках $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$, отриманих методом золь-гель за участі автогоріння та відпалених при температурах 500 – 800 °C.

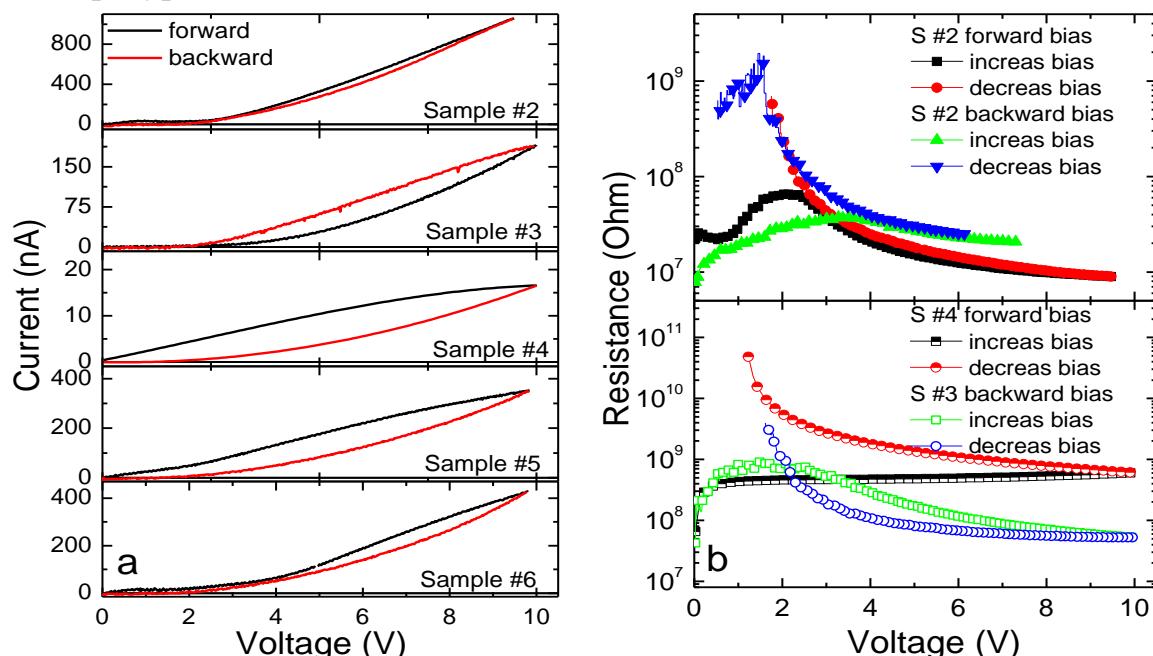


Рис.1 а) ВАХ досліджуваних порошків $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$, відпалених при 600, 700 та 800 °C (зразки #2, 3 та 4), ZrO_2 та HfO_2 відпалені при 800 °C (зразки #5 та 6). б) Залежність опору зразків # 2, 3 та 4 від прикладеної напруги.

Для дослідження особливостей транспорту носіїв електричного заряду та їх накопичення в досліджуваних порошках проведені вимірювання вольт-амперних характеристик (ВАХ) та частотних залежностей ємності і тангенса кута діелектричних втрат. Асиметричний

петлеподібний вигляд ВАХ, показаний на рис.1, пояснюється накопиченням заряду поверхнею наночастинок $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$.

Результати СЕМ підтвердили субмікронні розміри даних порошків. Рентгеноструктурні дослідження та спектри електронного парамагнітного резонансу фазового складу порошків показали наявність сегнетоподібної орторомбічної фази в наночастинках, великої концентрації вакансій кисню та інших домішок [1]. Саме ці фактори і спричиняють резистивне перемикання та накопичення заряду, що спостерігаються в порошках $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$.

Діелектрична проникність усіх зразків монотонно зменшується зі збільшенням частоти (рис.2а). Частка сегнетоподібної орторомбічної фази немонотонно залежить від температури відпалу, та зменшується від 90 об.% до 7 об.% із збільшенням температури відпалу від 600 °C до 800 °C (рис.2 б).

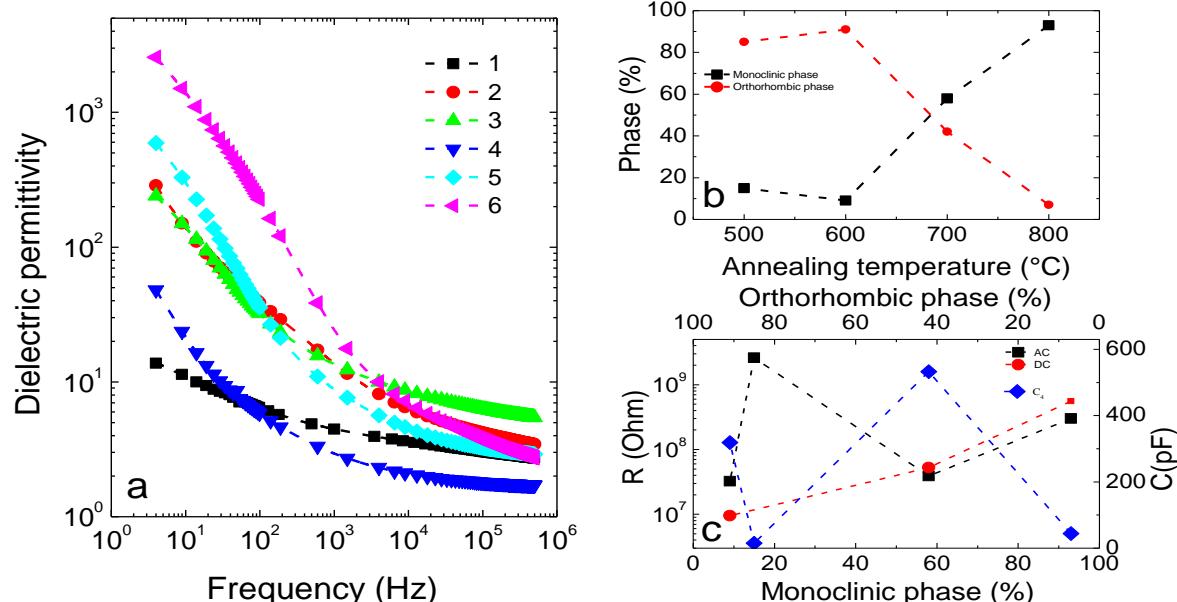


Рис.2. а) Частотна залежність діелектричної проникності ϵ порошків $\text{Zr}_{0.5}\text{Hf}_{0.5}\text{O}_2$. б) Залежність частки моноклінної та орторомбічної фаз від температури відпалу, відповідно. в) Залежність ємності та опору досліджуваних зразків від частки моноклінної/орторомбічної фази.

Подяки: Робота Ю.М.Г., О.С.П., Ю.О.З., Л.П.Ю. та А.О.Д. фінансуються Національним фондом досліджень України (грант N 2023.03/0132 «Багатократно вироджені метастабільні стани спонтанної поляризації в нанофероїках: теорія, експеримент та перспективи цифрової наноелектроніки» та грант N 2023.03/0127 «Кремнієсумісні сегнетоелектричні нанокомпозити для електроніки та сенсорів»). В.В.В. та В.М.П. фінансуються цільовою програмою Національної академії наук України, проект № 5.8/25-П «Енергозберігаючі та екологічно чисті нанорозмірні фероїки для розвитку сенсорики, наноелектроніки та спінtronіки».

Література

- [1]. O. S. Pylypchuk, et al. Resistive switching and charge accumulation in $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ nanoparticles (2025), <https://doi.org/10.48550/arXiv.2504.09715>.

The stabilization of azimuthal anchoring of LIPSS-modified SiO₂ surfaces by polymer post-treatment

I. Gvozdovskyy¹, H. Bohatyryova¹, S. Schwarz², K. Bischoff², R. Hellmann², I. Koshets³, A. Korchovij³, P. Lytvyn³, S. Chernyshuk¹

¹Institute of Physics, NAS of Ukraine, 46 Nauky ave., Kyiv, 03028, Ukraine

²University of Applied Sciences, Würzburger Straße 45, 63743 Aschaffenburg, Germany

³V. E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 41 Nauky ave., Kyiv, 03028, Ukraine

Today there exist various methods of processing of surface to obtain a uniform alignment of liquid crystals (LCs), *e.g.*, rubbing [1], photoalignment [2] and many other methods [3-7]. We should also highlight the perspective technique of alignment of LCs based on the laser-induced periodic surface structuring (LIPSS) recently studied in detail [8,9].

It is generally known that one of the main characteristics of aligning layer, possessing by anisotropic features, is the anchoring energy (AE), which is connected with period Λ and depth A of nanogrooves as follows [10]:

$$W_B = 2\pi^3 \times A^2 \times \frac{K}{\Lambda^3} \quad (1), \quad \text{where } K \text{ is the average value of elastic constants of the splay } K_{11}, \text{ twist } K_{22} \text{ and bend } K_{33} \text{ deformation of LC.}$$

The dependence of value of the azimuthal AE (AAE) on the depth A of nanogrooves of the LIPSS-treated titanium surfaces was early studied in [8].

The aligning features of transparent dielectric material, *e.g.*, sapphire, was studied in [11]. Due to some difficulties during LIPSS processing of surface, so-called *zebra-like* layer with periodic alternating both the nanostructured line and unstructured gap is formed [12] (Figure 1).

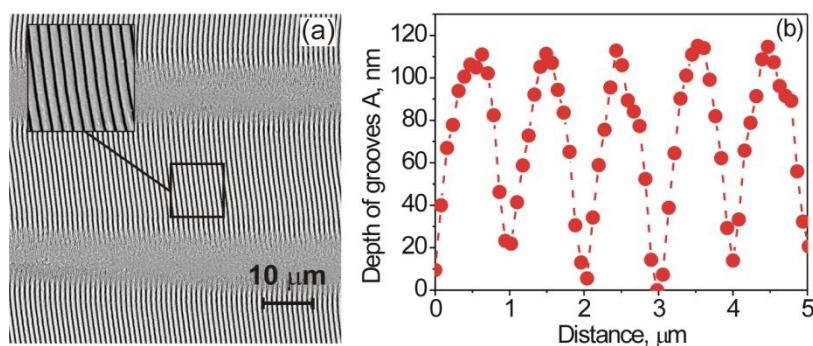


Figure 1. (a) SEM image of *zebra-like* layer. (b) The cross-section of the nanostructured line taken with the AFM.

As has been suggested previously [11,12], to increase the azimuthal anchoring the nanostructured surface is covered with polymer PI2555. The use of photosensitive polymer PVCN-F allows changing of AAE depending on irradiation conditions (*e.g.*, relative orientation between the light polarization and direction of nanogrooves) [12].

In this work the influence of nanogrooves period Λ (Eq. 1) on the value of AAE of the LIPSS-treated SiO_2 surfaces was studied. For this purpose, the femtosecond lasers with various wavelengths were used. Owing to the use of different lasers *zebra-like* layers are characterized by various periods Λ of nanogrooves (*i.e.*, 352, 556 and 1111 nm) and various width L of unstructured gaps (from 5 to 17 μm with a step of 2 μm). It was obtained that the decrease of the nanogrooves period Λ leads to increase of AAE (Figure 2a).

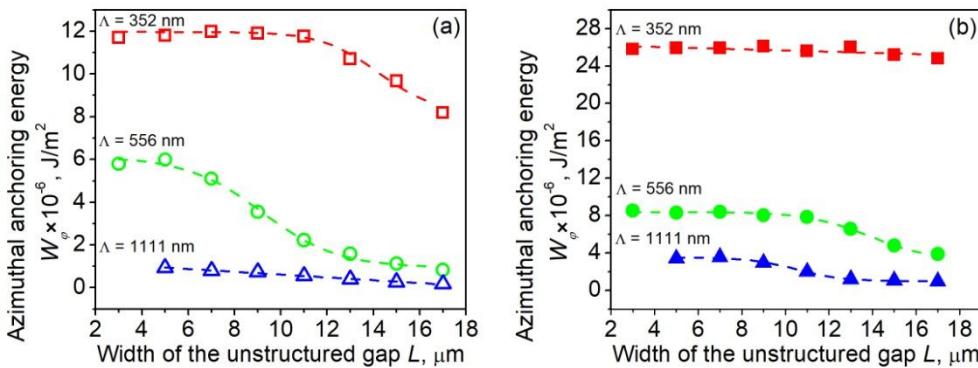


Figure 2. Dependence of AAE value for pure (a) and coated by polymer (b) *zebra-like* layer possessing various nanogrooves periods Λ on width L of the unstructured gap.

Figure 2b shows both increasing of AAE value and enhancing of stabilization of azimuthal anchoring (*i.e.*, when AAE does not change from width L of unstructured gap) after polyimide coating on the *zebra-like* surfaces having various periods Λ of nanogrooves and widths A of unstructured gaps. LIPSS-treated surfaces possessing 352 nm period covered with a layer of polyimide PI2555 are a very promising for future applications.

Acknowledgments: The authors I.G., H.B., I.K., P.L., A.K and S.C. thank warriors of the Armed Force of Ukraine who are protecting us during genocidal war in Ukraine.

Reference:

1. J. Cognard, Alignment of Nematic Liquid Crystals and Their Mixtures. London, New York, Paris. Gordon&Breach Science Publishers, 1982.
2. Yaroshchuk O, et al. J Mater Chem. 2012; 22: 286-300.
3. O. Yaroshchuk, et al. Liquid Crystals. 31 (2004) 859-869.
4. D. Dumont, et al. Mol. Cryst. Liq. Cryst. 375 (2002) 341-352.
5. P. Chaudhari, et al. Nature. 411 (2001) 56-59.
6. S. Y. Chou, et al. Science. 272 (1996) 85-87.
7. T.-C. Lin, et al. Soft Matt. 5 (2009) 3672-3676.
8. I. Pavlov, et al. Liq. Cryst. 45 (2018) 1265-1271.
9. I. Pavlov, et al. Liq. Cryst. 48 (2021) 131-149.
10. D.W. Berreman. Mol. Cryst. Liq. Cryst. 23 (1973) 215-231.
11. I. Gvozdovskyy, et al. Nanomater. 12 (2022) 508-1-15.
12. I. Gvozdovskyy, et al. J. Mol. Liq. 387 (2023) 122623-1-13.

Розрахунок оптичного спектру мас молекул тричастинкових іонів мюонію в одновимірному просторі

Гайсак М.І.

Інститут електронної фізики НАН України (м. Ужгород)

mykhaylo.haysak@gmail.com

В даній роботі представлені результати обчислень спектру мас тричастинкових систем, що складаються з мюонів (μ^-) та їх античастинок. Відомо, що мюони було відкрито Карлом Андерсоном і Сетом Наддермеєром у 1936 році, під час експериментального дослідження космічного випромінювання [1].

Розрахунки проведені в рамках тричастинкової квантово-механічної моделі, із застосуванням адіабатичного гіперсферичного підходу. Обчислені енергії зв'язку нижчих синглетних станів екзотичної тричастинкової квантової системи негативного та позитивного молекулярних іонів мюонію - ($\mu^+ \mu^- \mu^-$) та ($\mu^- \mu^+ \mu^+$) в одновимірному просторі. В якості базисних функцій вибрані власні функції узагальненого параметричного оператора кутового моменту при розв'язуванні крайової задачі з граничними умовами Дирихле. Власні значення є адіабатичні потенціали цієї крайової задачі, які параметрично залежать від радіальної змінної.

Нерелятивістська квантово-механічна модель задачі трьох тіл, у рамках якої виконані розрахунки, ґрунтуються на відносних колективних змінних Якобі [2, 3]. В даному випадку для знаходження частинних розв'язків нерелятивістського рівняння Шредінгера (НРШ) від трьох незалежних змінних задачу зведено до розв'язування двох крайових задач: знаходження адіабатичних потенціалів $U_v(R)$ та значень енергій (ε) основних і збуджених станів -непарної серії (oo) даної системи.

Числові розрахунки спектральних параметрів досліджуваних систем проведені з використанням програми Maple program (2017). Результати проведених розрахунків наведені в таблиці 1.

Таблиця 1

Результати розрахунків спектральних характеристик молекулярних екзотичних систем іонів мюонію серії (oo)

Стани	Енергія станів (MeV)	Інтервал радіальної змінної (a.u.)	Середній радіус стану (a.u.)	Діаметр молекули системи (m)
NI-1S ₀₀	20.345678916	[0,0.6]	0.32	1.692800×10^{-10}
NI-1S ₀₁	15.123456789	[0, 0.32]	0.85	5.8190×10^{-11}
NI-1S ₀₂	12.123456789	[0, 0.835]	1.58	1.85150×10^{-11}

Розрахунок екстремальних точок адіабатичного потенціалу, що визначаються непарними (oo) базисними функціями $\{\sin(2\alpha), \sin(6\alpha)\}$,

показує, що глибина потенціальної ями $|U_{\nu}(R)|$ даних систем становить відповідно для позитивного та негативного іонів мюонію:

- 30.69049025605 (а.о.), - 376.368844517145 (а.о.), а координати мінімуму r складають відповідно 0.468189357515186, та 0.106313817901552.

Позитивні іони, притягуючи негативні іони, утворюватимуть нейтральні молекули виду $(\mu^-\mu^+\mu^+)(\mu^-\mu^+\mu^-)$, тобто є шестичастинковими системами (нейтральними молекулами) [4].

На рисунках 1 та 2 представлені графіки хвильових функцій молекул тричастинкових іонів мюонію.

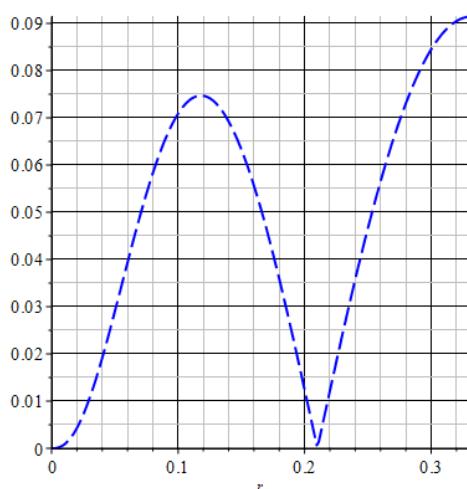


Рис. 1. Радіальна хвильова функція двофотонної тричастинкової молекули мюонію (oo) серії.

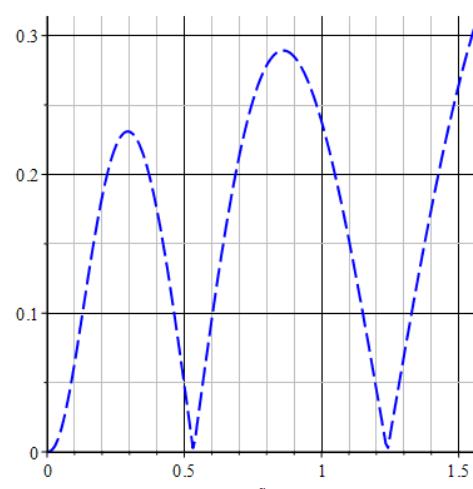


Рис. 2. Радіальна хвильова функція трифотонної молекули мюонію (oo) серії.

Примітка: вісь абсцис – радіальна змінна, вісь ординат – ймовірність значення хвильової функції НРШ (у %).

Отже, застосування тричастинкового квантово-механічного підходу та проведені чисельні розрахунки дозволяють припустити існування шестичастинкових нейтральних молекул мюонію. Оскільки у складі молекул іони різного знаку, вони притягуються, тому енергія зв'язку молекул більша за отримані в розрахунках значення.

- [1] [Anderson and Neddermeyer discover the muon](https://timeline.web.cern.ch/anderson-and-neddermeyer-discover-muon). CERN. Архів *оригіналу* за 20 лютого 2021. <https://timeline.web.cern.ch/anderson-and-neddermeyer-discover-muon>
- [2] Haysak M.I., Haysak I.I., Nagy M., Onysko V.V., Acta Physica Polonica A, 142 (4), 549-552 (2022); Doi: 10.12693/APhysPolA.142.549. <http://przyrbwn.icm.edu.pl/APP/PDF/142/app142z4p14.pdf>.
- [3] Haysak A.I., Haysak M.I., *Low Temperature Physics*, 51 (1), 123–126 (2025); Doi: <https://doi.org/10.1063/10.0034656>
- [4] Wolfe J. & Mysyrowicz A. Excitonic Matter. *Scientific American*, 250(3), 98-107 (1984) Retrieved October 12, 2020, from <http://www.jstor.org/stable/24969326>.

Optical properties of cadmium chalcogenides nanoparticles

Kashuba A.I., Ilchuk H.A., Semkiv I.V.

*Department of General Physics, Lviv Polytechnic National University, 12 Bandera Street,
79013 Lviv, Ukraine*

We report on the optical properties of cadmium chalcogenides (CdTe, CdSe and CdS) nanoparticles (NPs) located in water and the same NPs placed onto a quartz substrate, i.e. the structure NPs/quartz. For simplicity, we analyze the optical properties of an aqueous colloidal layer of cadmium chalcogenides NPs with the thickness of 1 μm and a plane-parallel shape. We consider a normal light incidence on this layer. The dependences of the transmission and reflection coefficients of this structure on the wavelength λ of light are calculated using a known transfer-matrix method [1, 2]. The effective refractive indices of colloidal solutions of the cadmium chalcogenides NPs are calculated using a Bruggeman mean-field approach [3, 4]. The latter assumes that different components of the colloidal solution (the NPs and the solvent in our case) are mixed uniformly to form a homogeneous mixture. The size of the NPs remains much smaller than the wavelength λ (usually up to 0.1λ), which allows for neglecting any scattering effects. The calculations are based on the assumption that the shape of the cadmium chalcogenides NPs does not differ significantly from a spherical one. The particles are isolated, do not stick together, and they form no aggregates.

The optical parameters are calculated for different concentrations of the cadmium chalcogenides NPs in water (in the interval 0–100 % with the step 5 %). The optical transmission and reflection, the refractive index and the extinction coefficient are analyzed in the spectral range 500–1500 nm.

It is shown that the integral values of the optical transmittance and reflectance increase with decreasing content of the cadmium chalcogenides NPs in water and structures based on them. A decrease in the cadmium chalcogenides NP concentration leads to a decreasing intensity of the interference peaks. It has also been demonstrated that the quartz substrate does not affect the absolute values of the refractive index and the extinction coefficient of the cadmium chalcogenides NPs in water.

The refractive index and the extinction coefficient decrease with decreasing content of the cadmium chalcogenides NPs in water. The optical dielectric functions ε_1 and ε_2 are calculated from the spectral dependences of the refractive index and the extinction coefficient with using the Kramers–Kronig relations. The high-frequency dielectric constant, the ratio of the carrier density to the effective carrier mass (N_e/m^*) and the relaxation time (τ) are obtained from the dispersion of the optical dielectric function. The numerical values of the optical parameters obtained from our calculations are consistent with the experimental data known from the literature. These parameters are analyzed depending on the cadmium chalcogenides NP

concentration in water (for example, the dependence of the τ parameter on the ratio (N_c/m^*) for CdTe NP is shown in Fig. 1). We assume that our results might be important for a better understanding of the optical properties of the cadmium chalcogenides NPs in aqueous media and for developing biotechnology and the related research fields.

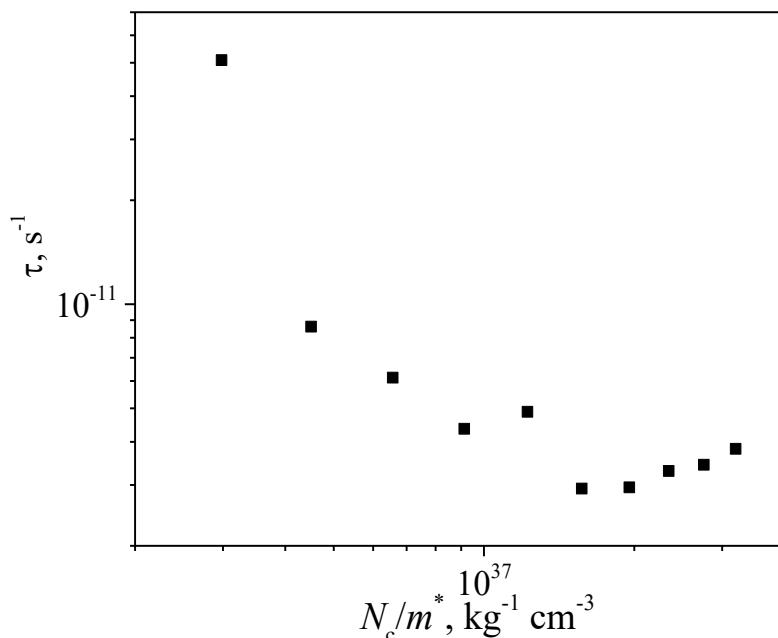


Fig. 1. Dependence of τ on (N_c/m^*) for CdTe NPs in water.

Acknowledgement. This work was supported by the Project #0124U000760 for Young Scientists granted by the Ministry of Education and Science of Ukraine.

1. Mackay, T. G., Lakhtakia, A. (2020). The transfer-matrix method in electromagnetics and optics. In: Mackay, T. G., Lakhtakia, A. (Eds), *Synthesis Lectures on Electromagnetics*. Springer Cham, Springer Nature, Switzerland.
2. Kashuba, A.I., Petrus, R.Y., Kushnir, O.S., Ilchuk, H.A., Semkiv, I.V., Kashuba, N.Y. (2025). Optical properties of CdTe nanoparticles in water. *Ukr. J. Phys. Opt.*, 26(2), 02001-02009.
3. Bergman, D. J. (1991). Effective medium approximation for nonlinear conductivity of a composite medium. In: Dal Maso, G., Dell'Antonio, G. F. (Eds), *Composite Media and Homogenization Theory. Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications*, Vol. 5. Birkhäuser, Boston.
4. Tjaden, B., Cooper, S. J., Brett, D. J. L., Kramer, D., Shearing, P. R. (2016). On the origin and application of the Bruggeman correlation for analysing transport phenomena in electrochemical systems. *Current Opinion in Chem. Engin.*, 12, 44–51.

Фотонна емісія з планарних наноструктур золота на діелектричній підкладці

Кіяєв О.Е.

Інститут фізики НАН України, просп. Науки, 46, 03028 Київ, Україна

Відомо, що у острівцевих металевих плівках на діелектричних підкладках, виготовлених методом формування, при пропусканні крізь них електричного струму спостерігається емісія електронів та фотонів [1]. Емісія електронів та фотонів йде не з усієї плівки, а з окремих центрів, при цьому центри емісії електронів та фотонів збігаються [2]. Візуально центри світіння виглядають як окремі точки, що мають різне забарвлення, від червоного до блакитного [3]. Спектри випромінювання окремих центрів складаються з широких смуг, відносна інтенсивність яких може змінюватись у широких межах. Для острівцевих плівок золота на склі найчастіше спостерігаються максимуми в районі 445 нм, 560 нм, 650 нм.

Вважається, що світіння йде з острівців, у яких відбувається нерівноважний розігрів електронного газу [1]. Пропоновані механізми світіння: непружне тунелювання та непружне відбиття електрона від потенційного бар'єру між острівцями, радіаційний розпад плазмонів, міжзонні переходи.

Однак нові експериментальні дослідження центрів світіння показали, що центри світіння у плівках золота на склі виглядають не як точки з розмитими контурами, а мають вигляд схожий на комету (Рис.1).

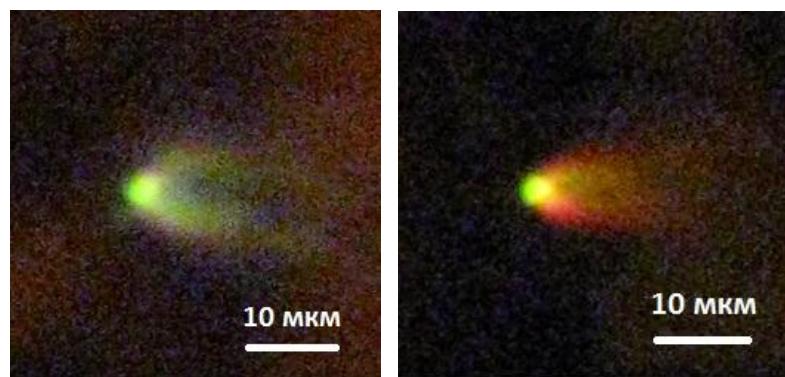


Рис. 1. Оптичні мікрофотографії центрів світіння в острівцевій плівці золота

При цьому на фотографіях досить чітко видно деталі ядра та хвостів «комети». Хвости утворюються, мабуть, за рахунок випаровування негативно заряджених багатоатомних кластерів золота з ядра комети та спрямовані на позитивний електрод.

Розмір ядер «комет» 0,5 – 5 мкм. Напруга при якої спостерігається світіння становила 8-25 В. Світіння йде як із ядра «комети», так і з хвостів. При цьому в спектрах світіння кожної окремої «комети» спостерігаються всі довжини хвиль, згадані вище. Очевидно, колір кожного конкретного центру світіння, що візуально спостерігається, залежить від переважання в спектрах ядра і хвостів «комети» випромінювання на якийсь певній довжині хвилі.

Отримані результати не можуть бути пояснені в рамках уявлень, що склалися, про генерацію гарячих електронів у металевих наночастинках [1]. Тому необхідно подальше вивчення центрів світіння в острівцевих металевих плівках.

1. R.D. Fedorovich, A.G. Naumovets, P.M. Tomchuk, Electron and light emission from island metal films and generation of hot electrons in nanoparticles, *Physics Reports* 328 (2000) 73-179
2. П.Г. Борзяк, Ю.О. Кулюпін, О.Г. Сарбей, Р.Д. Федорович, Дослідження центрів світіння та електронної емісії у диспергованих золотих плівках, УФЖ, т.14, №3, с.395-401 (1969)
3. Borzjak P.G., Sarbej O.G., Fedorowitsch R.D. Neue erscheinungen in sehr dunnen metallschiechten // phys. stat. sol. – 1965. – Vol. 8, N1. – P.55-58.

Spectral features in nanocomposite film materials based on polysaccharides

Kravchenko S.O., Boltovets P.M., Kovalenko O.G., Snopok

Institute of semiconductor physics NASU

Institute of microbiology and virology NASU

The formation of composite materials based on organic low-dimensional structures is a promising field in modern materials science. At the same time, the physical properties of the basic structure can change quite significantly, so it is important to understand the mechanisms of these changes. Gold nanoparticles (GNPs) capped with various natural polymer matrices are of particular interest due to their intensive using in nanotechnology with application from plasmonics to biomedicine. Synergistic combination of natural polymer matrix properties (physicochemical and biological ones) and metallic core (optical, biological, thermophysical and electrical ones) determines the promising characteristics of nanocomposites obtained on such background.

In this work, a comparative IR spectra study in the surface film of polysaccharides and their composite with gold nanoparticles (Au NPs) on the glass was carried out. The polysaccharide glucuronoxylomannan (GXM) (Fig.1) was extracted from a yellow brain mushroom *Tremella mesenterica*.

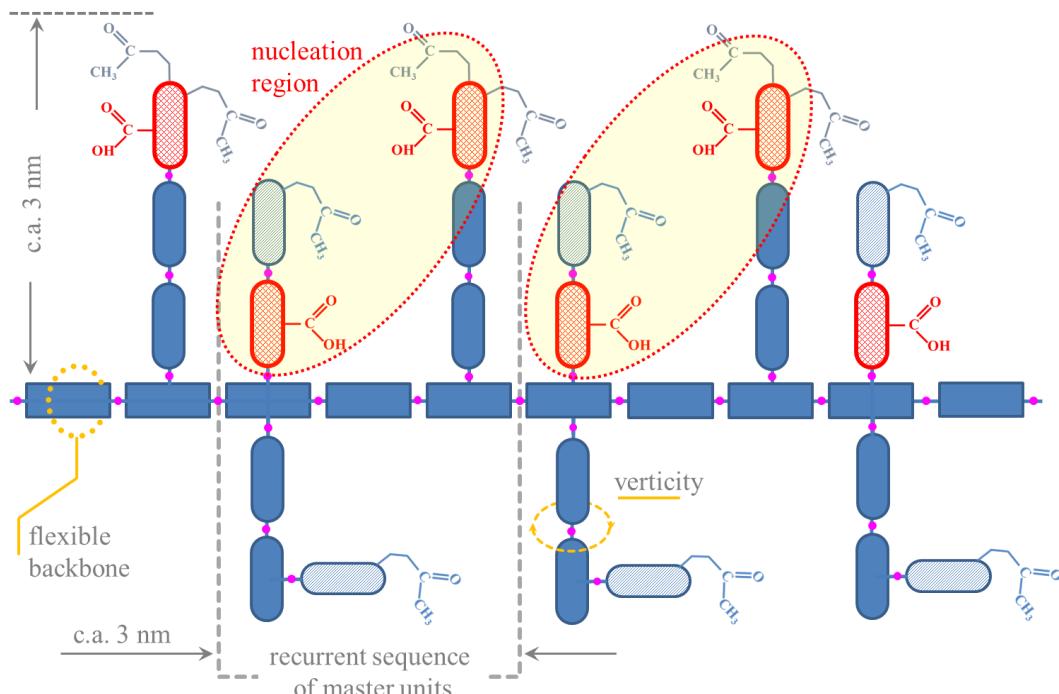


Fig.1. The GXM structure.

The region of $800\text{-}1800\text{ cm}^{-1}$ is characterized by a qualitative correspondence of the absorption bands of samples with and without gold

nanoparticles. Only an increase of about 4 times is observed for typical polysaccharide bands with a partial redistribution of intensity.

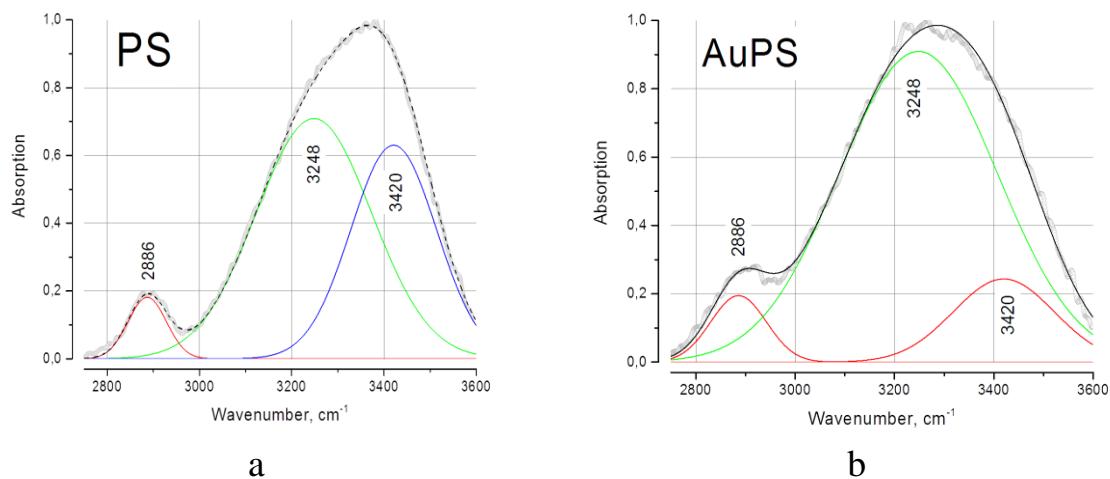


Fig.2. IR spectra: (a) polysaccharide, (b) polysaccharide with Au NPs

For the region above 2000 cm⁻¹ (Fig.2) a more specific picture is observed. A significant increase in the complex band at 2350 cm⁻¹ is accompanied by a redistribution of bands in the region typical of OH vibrations. A more detailed analysis shows that while maintaining the intensity of the band at 2886 cm⁻¹ (C-H), the redistribution of bands corresponding to different types of OH groups is quite significant.

Thermal Transport and the Boson Peak in Disordered and Layered Solids

A.I. Krivchikov^{1,2} & A. Jeżowski²

¹*B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering, Kharkiv, Ukraine*

²*Institute of Low Temperature and Structure Research PAS, 50-422 Wrocław,*

One of the enduring challenges in the physics of disordered solids is understanding the origin of low-temperature anomalies in their thermal properties [1]. Despite extensive experimental and theoretical efforts, including studies of heat capacity and thermal conductivity, the mechanisms behind these anomalies remain incompletely understood. This report presents a comprehensive analysis [2, 3, 4] of low-temperature heat capacity and thermal conductivity data across a wide range of materials—crystalline, amorphous, and glassy systems, including molecular solids, metallic glasses, polymers, semiconductors and other non-magnetic compounds. Special focus is given to the boson peak phenomenon, typically observed as an excess in the vibrational density of states (VDOS) and manifested as a hump in C_p/T^3 vs. T plots. While this feature is common in amorphous materials, its absence in layered and molecular solids with 2D stacking highlights the role of anisotropic phonon dispersion and flexural modes in shaping the low-energy excitation spectrum [5, 6].

This absence suggests that these materials do not exhibit the same low-energy phonon anomalies commonly seen in amorphous systems, indicating a more well-ordered phonon spectrum with no significant excess in low-frequency vibrational modes beyond what is expected from standard phonon dispersion relations (see Fig. 1).

The study also revisits the thermal conductivity behavior of disordered materials, identifying two distinct transport channels related to the quantum dualism of vibrational excitations. An analytical Arrhenius-type temperature dependence is proposed to describe the thermal conductivity across varying degrees of disorder [8]. This approach aligns with recent developments in quantum field theoretical descriptions of heat transport, particularly the Simoncelli-Marzari-Mauri framework [9], offering a unified view of thermal conductivity in both ordered and disordered systems. These findings contribute new insights into the vibrational dynamics of complex solids and challenge established assumptions about low-energy phonon behavior in reduced-dimensional systems.

This work was partly supported by the National Research Foundation of Ukraine (Grant 2023.03/0012) and National Science Centre Poland (Grant 2022/45/B/ST3/02326).

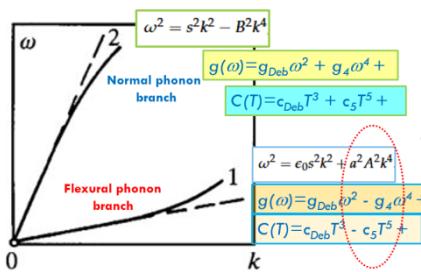


Figure 1: Dispersion law for transverse phonon branches for the flexural branch (1 curve) and for the normal branch (2 curve). The dashed line is a linear dispersion accordingly [7]. A deviation from linear dispersion greatly affects the VDOS and low-temperature heat capacity.

REFERENCES

1. M. A. Ramos. Low-temperature Thermal And Vibrational Properties Of Disordered Solids: A Half-century Of Universal” Anomalies” Of Glasses. World Scientific, 2022.
2. D. Szewczyk et al., Sci. Rep. 11 (2021) 1.
3. Y. Miyazaki et al., J. Phys. Chem. Lett. 12 (2021) 2112.
4. A. I. Krivchikov et al., J. Phys. Chem. Lett. 13 (2022) 5061.
5. Barabashko, M. S., et al. "Experimental Evidence of Flexural Phonons in Low-Temperature Heat Capacity of Carbon Nanotubes." Carbon Trends (2025): 100479.
6. Szewczyk, Daria, et al. "Specific heat at low temperatures in quasiplanar molecular crystals: Origin of glassy anomalies in minimally disordered crystals." Physical Review B 110.17 (2024): 174204.
7. Kosevich, Arnold M. "The crystal lattice: phonons, solitons, dislocations, superlattices." (2006).
8. Krivchikov, Alexander I., et al. "Exponential approximation of the coherence contribution to the thermal conductivity of complex clathrate-type crystals." Materialia 32 (2023): 101944.
9. M Simoncelli, et al., Nature Physics, 15 (2019) 809.

Nonlinear properties of Au(nanoparticle)-Al₂O₃-PdO thin films under nanosecond laser excitation at 532 and 1064 nm

Liakhovetskyi V.^{1,2}, Rudenko V.¹, Styopkin V.¹, Brodin A.², Volovyk M.¹

¹ Institute of Physics of the NAS of Ukraine, 46, av. Nauki, Kyiv, 03028,

² National Technical University of Ukraine "Kyiv Polytechnic Institute",
37, Pr. Beresteiskyi, Kyiv, 03056.

This work presents the results of studies of the nonlinear optical properties of thin three-layer Au(nanoparticle)-Al₂O₃-PdO films. The values of the real and imaginary parts of the third-order nonlinear susceptibility have been determined: $\text{Re}\chi^{(3)}$ and $\text{Im}\chi^{(3)}$. The study was carried out using the z-scan method when excited by nanosecond laser radiation at wavelengths of 532 and 1064 nm.

It is known that single-layer island films of gold Au(nanoparticles) are a good nonlinear optical medium when excited by radiation at 532 and 1064 nm with a high value of the real part of the third-order nonlinear susceptibility $\text{Re}\chi^{(3)}$, which is responsible for nonlinear refraction. In this work, the value of $\text{Re}\chi^{(3)}$ was obtained in the range of $-(1 \div 3) \cdot 10^{-5}$ esu for a wavelength of 532 nm and in the range of $-(1 \div 5) \cdot 10^{-6}$ esu for a wavelength of 1064 nm. We propose to add to this structure a thin semiconductor layer of PdO separated from the gold nanoparticles by a layer of Al₂O₃ dielectric. PdO thin films are also an effective nonlinear optical material at the studied wavelengths. Both nonlinear materials are strongly absorbing at 532 nm and quite transparent at 1064 nm.

The obtained results show that at 532 nm, the addition of a PdO layer slightly changes the real part of the nonlinear susceptibility but significantly increases the imaginary part of the third-order nonlinear susceptibility $\text{Im}\chi^{(3)}$, which is responsible for nonlinear absorption.

The results of the studies at 1064 nm are more interesting. We observed that the addition of a thin layer of PdO to the gold island film leads to a change in the sign of the refractive nonlinearity, while the absolute value remains significant. This makes it possible to create regions with high nonlinear refraction of different signs on the same sample.

Thermal conductivity features in phosphorus van der Waals chalcogenides near the morphotropic phase boundary

V. Liubachko, R. Yevych, V. Yevych, Yu. Vysochanskii

Institute for Solid State Physics and Chemistry, Uzhhorod National University, Uzhhorod,
88000, Ukraine, vitalii.liubachko@uzhnu.edu.ua

According to the results of previous studies on the thermal properties of van der Waals (vdW) crystals based on the CuInP₂S₆ family, some of these materials exhibit low thermal conductivity over a wide temperature range [1]. This indicates that these materials have the potential to be used in thermoelectric devices required for applications where very low thermal conductivity is critical. Overall, these studies have shown that heat transfer in the investigated crystals occurs via phonon processes and is strongly influenced by anharmonicity. Nevertheless, the observations revealed deviations from the predictions of three-phonon processes for the monoclinic crystal CuInP₂S₆, while the trigonal AgInP₂S₆ clearly follows the Eucken's law. In our previous works [2, 3], we investigated the complex interaction between the indium and copper cationic sublattices in the origin of the ferrielectricity of CuInP₂S₆ crystals. The study showed that indium plays a key role in the polar ordering.

The thermal conductivity of crystals with a large number of atoms in the elementary cell, which have a large number of phonon dispersion branches coupling and mixing with increasing wave vector through the Brillouin zone, can be described by considering two channels: a phonon gas channel and the diffusion channel. The two-channel heat transfer can be described as $\kappa(T)=A/T+B$, where the parameter *A* represents the three-phonon scattering mechanism, while parameter *B* represents the additional contribution of diffusive transfer [4, 5]. In the CuInP₂S₆ crystal (Figure 1), a clear appearance of diffusive-like heat transfer is already observed in the low temperature range of the ferrielectric phase, which is apparently related to the anharmonic dynamics of the indium cations [6]. At temperatures above 200 K up to the ferrielectric-paraelectric phase transition ($T_C \approx 312$ K), the thermal conductivity is effectively suppressed due to the presence of disorder in the copper sublattice related to the second order Jahn-Teller effect (SOJT), what also promotes thermal throwing of copper cations into the vdW gap. For partial Cu→Ag substitution at approaching to the morphotropic phase boundary, the diffusive contribution is reduced.

At the transition from AgInP₂S₆ to CuInP₂S₆, the ferroelastic trigonal to monoclinic transformation of the crystal structure is apparently related to the crystal lattice anharmonicity caused by thermal throwing of copper cations from quasitrigonal polar positions within the structural layers to quasitetrahedral positions located in the vdW gap. Placed in the vdW gap copper cations form

covalent bonds with sulfur anions belonging to the neighboring structural layer. Such 'across the vdW gap' covalency induces a relative shift of the neighboring structural layer. Substitution of Cu by Ag effectively reduces the probability of the thermally activated relaxant cation jumping into the vdW gap, thereby avoiding the 'across the vdW gap' covalency and inducing relative sliding of the structural layers. The coupling of copper cations with shear modes of rigid structural layers appears to play a leading role in the mechanisms of monoclinic to trigonal transition and is clearly reflected in the thermal properties of CuInP_2S_6 type layered crystals.

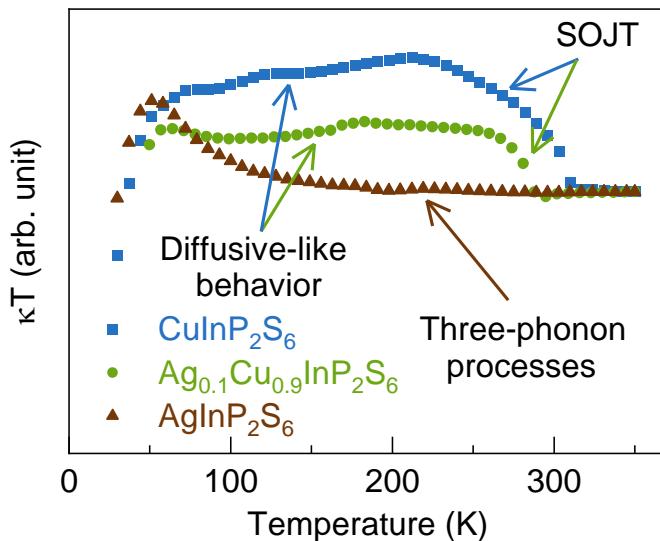


Figure 1. Thermal conductivity in $\kappa T(T)$ coordinates for CuInP_2S_6 (blue squares), $\text{Ag}_{0.1}\text{Cu}_{0.9}\text{InP}_2\text{S}_6$ (green circles) and AgInP_2S_6 (brown triangles) [1].

Acknowledgment: This work has been partly supported by the Horizon Europe Framework Programme, project no. 101131229, (PIEZO 2D) and by the external assistance instrument of the European Union to fulfill Ukraine's obligations under the European Union Framework Program for Research and Innovation Horizon 2020, no. 0124U004302 (PH/41-2024).

- [1] V. Liubachko, A. Oleaga, A. Salazar, A. Kohutych, K. Glukhov, A. Pogodin, Yu. Vysochanskii. Phys. Rev. Mater. 3, 104415(1-9) (2019).
- [2] Yu. Vysochanskii, V. Liubachko, K. Glukhov, R. Yevych, A. Kohutych, V. Hryts, A. Dziaugys, J. Banys. Ferroelectrics. 618, 906 (2024).
- [3] Yu. Vysochanskii, V. Liubachko, R. Yevych, K. Glukhov, A. Kohutych, V. Hryts, A. Dziaugys, J. Banys. IEEE ISAF. (2023).
- [4] V.A. Konstantinov, V.G. Manzhelii, M.A. Strzhemechny, S.A. Smirnov, Low Temp. Phys. 14, 48 (1988).
- [5] V.A. Konstantinov. Low Temp. Phys. 29, 422 (2003).
- [6] R. Yevych, V. Liubachko, V. Hryts, M. Medulych, A. Kohutych, Y. Vysochanskii. Condensed Matter Physics. 27, 14701 (2024).

A novel theoretical framework for 2D magnetoplasmon dispersion: a Laplace transform approach

Lyaschuk Yu. M., Korotyeyev V.V.

V. Ye. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics (ISP), NASU, Kyiv, 03028,
Ukraine

For a long time, 2D-plasma oscillation in the presence of a magnetic field was extensively studied both theoretically [1, 2], and experimentally. Finding the 2D-magnetoplasmons dispersion law usually involves a solution of the dispersion equation [2], assuming so called quasistatic approximation. This approximation discards retardation effects, allowing to significantly simplify the dispersion equation. This approximation holds for very large wavevectors, but fails for smaller ones. This area of small wavevectors is especially important because of its proximity to the light cone. Without this approximation, the solution of the full equation is very challenging, moreover, it suffers from poor numerical stability and requires careful choice of the branches of multi-valued complex functions. From a mathematical standpoint, a formulation of the dispersion equation involves an assumption of time dependence as exponentially decaying harmonic oscillations $\exp(-\omega''t-i\omega't)$. Such an approach can miss some physically relevant modes with non-exponential decay or nonharmonic dependence on time. To avoid all the mentioned problems, a Laplace transform framework was developed and implemented. It not only allows recovery of all solutions of the dispersion equations but also helps to analyze borderline cases where the dispersion equation loses validity. This approach was pioneered in the classical work on plasma oscillation [3], but nowadays it is applied more broadly, including investigation of graphene collective oscillation [4]. Instead of the usual Fourier transform we are applying the Laplace transform to the Maxwell equations, specifically to all functions with time domain dependence. The Laplace transform definition:

$$F(p) = \mathcal{L}\{f(t)\} = \int_0^{\infty} f(t)e^{-pt} dt.$$

The transformation allows us to replace all of the time derivatives with algebraic expressions that contain the initial condition, specifically, current and field values at $t=0$, which helps reformulate the problem of solving differential equations into algebraic problems in the frequency domain (p-domain). The time dependence of electric $E(t)$ and $H(t)$ fields can be obtained from the corresponding p-domain functions using the inverse Laplace transform. Because of the complexity of the underlying expression for the Laplace components, the direct analytical inversion is very challenging, an advanced method of numerical integration that relies on Gaussian quadrature was used, which was introduced in [5].

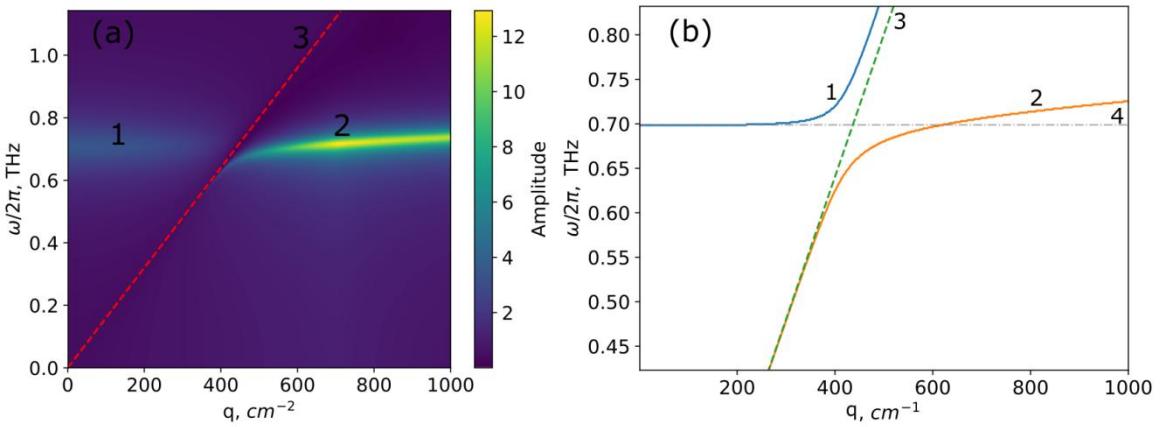


Fig 1.(a): a heatmap of the Fourier components amplitude for different wavevectors. “Hot” zones correspond to different resonant modes: 1 – cyclotron resonance, 2 – magnetoplasma waves, dashed line 3 – light frequency in the medium, which separates the light cone (nonlocal modes) and usual local modes. (b): corresponding dispersion branches extracted from the heatmap: 1 – cyclotron resonance branch, 2 – magnetoplasmon resonance branch, 3 – light frequency, 4 – cyclotron frequency.

The example of such a numerical simulation is presented in Fig 1. The simulation parameters were chosen to correspond to GaN-based heterostructures: $m_{eff} = 0.2m_0$, $\epsilon = 8.9$, 2DEG electron concentration $n^{2D} = 2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, momentum scattering rate $\gamma = 10^{11} \text{ c}^{-1}$, and magnetic field strength $H = 5 \text{ T}$. On the left panel, one can see that the cyclotron mode is weakly dispersive, located inside the light cone and has relatively low intensity compared to the magnetoplasmon branch. In Fig 1(b), we can see that dispersion branches reveal anti-crossing behavior, and the magnetoplasmon branch is becoming light-like at very small wavevectors.

- [1] Kushwaha, Manvir S. 2001. “Plasmons and Magnetoplasmons in Semiconductor Heterostructures.” *Surface Science Reports* **41** (1-8) 1–416.
- [2] Chiu, KW, and JJ Quinn. 1974. “Plasma Oscillations of a Two-Dimensional Electron Gas in a Strong Magnetic Field.” *Physical Review B* **9** (11). APS: 4724.
- [3] Landau, L. 1946. “On the Vibrations of the Electronic Plasma.” *Zhurnal Eksperimentalnoi I Teoreticheskoi Fiziki* **16** (7). 574–86.
- [4] Kukhtaruk, SM, and VA Kochelap. 2015. “Semiclassical Analysis of Intraband Collective Excitations in a Two-Dimensional Electron Gas with Dirac Spectrum.” *Physical Review B* **92** (4). APS: 041409.
- [5] Den Iseger, Peter. 2006. “Numerical Transform Inversion Using Gaussian Quadrature.” *Probability in the Engineering and Informational Sciences* **20** (1). Cambridge University Press: 1–44

Поляризаційні дослідження тонких плівок CuO

Матяш І.Є., Мінайлова І.А., Братусь О.Л., Семенюк А.С.

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України,
03028, Україна, Київ, просп. Науки, 41

На сьогодні існує значна зацікавленість учених з усього світу в дослідженні різних властивостей тонких плівок оксиду міді (CuO), оскільки на їх основі розробляють високоефективні оптоелектронні прилади. Відомо, що цей матеріал придатний для використання в сонячних панелях в якості поглинача від якого в значній мірі залежить ефективність колектора, а також довговічність його роботи. Отже, необхідна висока якість тонких плівок CuO і технологія їх виробництва тут відіграють вирішальну роль, тому що властивості тонких плівок суттєво залежать саме від технологічних режимів напилення. Останні досягнення ефективності сонячних елементів на основі CuO показують 8,4%, але робота в цьому напрямку тільки набуває розвитку [1].

Тонкі плівки Cu на підкладці з плавленого кварцу було виготовлено методом термічного випаровування на установці ВУП-5 з подальшим відпалом при температурі 400 °C протягом 30 хвилин для утворення CuO. В роботі проводились вимірювання інтенсивностей коефіцієнтів внутрішнього відбиття s- і p-поляризованого випромінювання (R_s^2 і R_p^2 відповідно) від тонких плівок, а також їх поляризаційної різниці $\rho=R_s^2-R_p^2$. Вказані поляризаційні характеристики вимірювали за допомогою методу модуляційної поляриметрії (МП), схема установки якої побудована за геометрією Крейчмана і детально описана в [2]. Показник заломлення кварцевого напівциліндра і підкладок $n = 1,45$ визначав значення критичного кута повного внутрішнього відбивання як $\theta_{kp} = 43,6^\circ$.

В початкових зразках плівок Cu експериментально було встановлено беззаперечну наявність поверхневого плазмон-поляритонного резонансу, який фіксується за зменшенням інтенсивності відбивання p-поляризованого випромінювання R_p при кутах падіння світла більших за критичний у вузькому діапазоні кутів. Далі плівки Cu відпалювались з утворенням CuO, оскільки відомо, що при відпалі за температури вище 350°C має утворюватися вказаний оксид, і подальші дослідження свідчать про повне перетворення плівки.

На рис. 1 наведено результати вимірювання сім'ї кутових залежностей поляризаційної різниці $\rho(\Theta)$ для плівок CuO у діапазоні довжин хвиль $\lambda=500\text{-}1000$ нм. Повністю відсутні прояви поверхневого плазмон-поляритонного резонансу, наявність яких свідчило б про залишок металевої фази. Для довжин хвилі більше 800нм показник поглинання CuO дорівнює нулю, що проявляється у майже горизонтальній залежності $\rho(\Theta)$ при кутах більше критичного (при

перетворенні плівки Cu у Cu_2O вказаних характер кривих починається б з довжини хвилі 600 нм). Для довжин хвилі менше 800 нм показник поглинання CuO більше нуля, що призводить до порушеного повного внутрішнього відбивання при кутах більше критичного, але без резонансної взаємодії випромінювання з плівкою.

Залежності відбивання R_s , R_p і ρ від кута падіння світла було описано рівнянням отриманим методом матричного перетворення

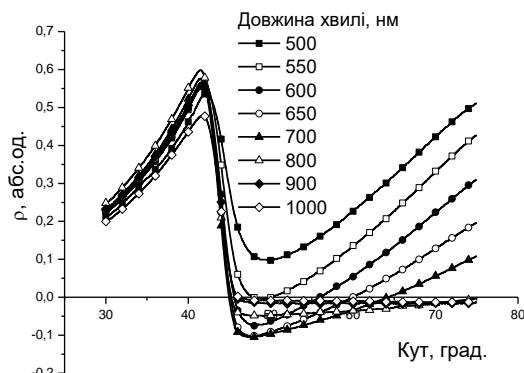


Рис. 1 Експериментальні залежності поляризаційної різниці ρ від кута падіння випромінювання для плівок CuO при різних довжинах хвилі

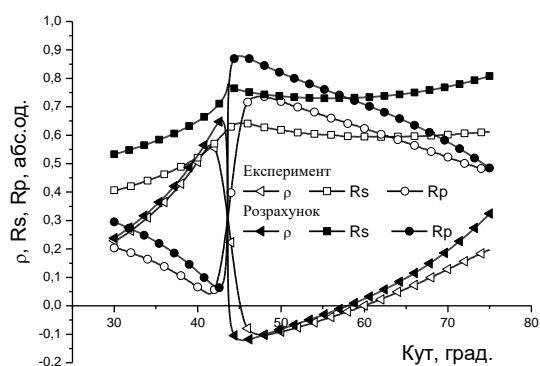


Рис. 2 Експериментальні та розрахункові залежності R_s , R_p і ρ від кута падіння випромінювання для плівок CuO при довжині хвилі 650 нм

формул Френеля для тришарової моделі скло-плівка-повітря, в якій плівка вважається плоскою і однорідною. На рис. 2 показано результат розрахунку порівняно з експериментальними кривими для довжини хвилі 650 нм. Прийнятний збіг результатів отримано при товщині плівки $d = 40$ нм, при цьому значення показника заломлення $n=3,25$ та поглинання $k=0,3$ взято з літератури. Розбіжність між теорією та експериментом, що залишилася, можна пояснити, по-перше, шорсткістю плівки, яка хоч і незначна, але впливає на вимірювання і не враховується розрахунком і, по-друге, неоднорідністю складу і структури плівки, яку можна врахувати, ввівши для неї ефективні оптичні параметри.

Таким чином, в роботі доведено, що використана технологія призводить до створення достатньо якісних плівок CuO .

Список літератури:

1. T.K.S. Wong, S. Zhuk, S. Masudy-Panah, G.K. Dalapati, Current Status and Future Prospects of Copper Oxide Heterojunction Solar Cells. Materials 9, 2016, p. 271, <https://doi.org/10.3390/ma9040271> AMA Style.
2. E.B. Kaganovich, I.M. Kizyak, E.G. Manoilov, L.S. Maksimenko, I.E. Matyash, S.P. Rudenko, B.K. Serdega. Polarization-modulation spectroscopy of the surface plasmon resonance in gold nanostructures obtained by the method of pulsed laser deposition. Ukr. J. Phys. 54(6), 2009, p. 621.

The influence of Ar⁺ implantation on infrared emission properties of phase-change VO₂ thin films

Maziar D.M., Kolomys O. F., Nikolenko A.S., Strelchuk V.V., Lytvyn P.M., Tsybrii Z.F., Melezhyk Ye.O., Zabudsky V.V., Kukhtaruk N.I.

V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, prospect Nauky, 41, Kyiv-03028, Ukraine.

Vanadium dioxide (VO₂), a phase-change material, exhibits sharp changes in infrared (IR) properties and thermal emissivity during its metal–insulator transition, which occurs at 68 °C. VO₂-based smart materials have been widely used to control the spectral properties of films in the terahertz, infrared, and visible regions. This phase transition is accompanied by a sharp change in electrical conductivity, reflectance and emissivity in the mid- and long-wave infrared ranges, thus enabling active modulation of infrared emission. Predictive control of the spectral and emission properties of VO₂ materials is crucial for their application in advanced infrared and optoelectronic devices.

In this study, we examine the effects of Ar⁺ ion implantation of VO₂ thin films grown by magnetron plasma sputtering on Si substrates regarding their structural and infrared emissive properties. Recent studies have shown that argon ion (Ar⁺) implantation in VO₂ films is an effective tool for fine-tuning the temperature parameters of the phase transition. In particular, structural disorder induced by

implantation results in a controllable reduction in the transition temperature [1].

To investigate the infrared emission properties of VO₂/Si thin films, including those modified by Ar⁺ ion implantation, infrared thermography and Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy were employed in the spectral range of 8–12 μm.

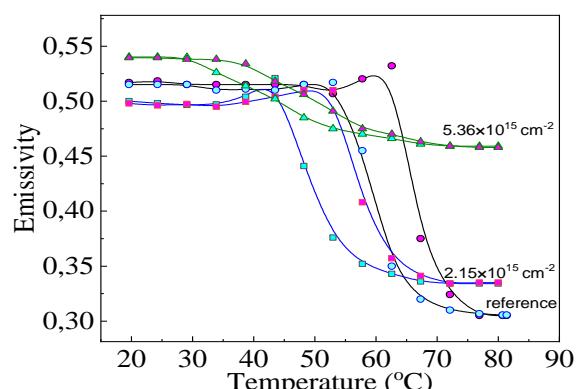


Fig. 1. Temperature dependence of emissivity for non-implanted and Ar⁺-implanted VO₂ thin films.

allowing observation of the temperature-dependent behaviour of emissivity and the hysteresis loops typical for phase transitions (fig. 1).

The emissivity of the reference VO₂ film at structural phase transformation from the low-temperature monoclinic (M1) phase to a high-temperature metallic (rutile R) phase changed from 0.52 to 0.3, respectively. Ar⁺ implantation has practically no effect on the emissivity in the insulating phase (0.51-0.54), in contrast

Infrared thermography measurements were carried out during controlled heating and cooling cycles,

to a metallic state, where the emissivity of thin films doped at doses of 2.15×10^{15} and $5.36 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ was changed from 0.3 to about 0.34 and 0.46, respectively. Analyzing the thermal emissivity during heating and cooling allowed us to obtain a hysteresis curve that reflects the phase transition. The transition temperatures with increasing implantation dose are reduced from 67 °C (reference film) to 48 °C and 42 °C, respectively.

Temperature-dependent transmittance and reflectance spectra in the 2–20 μm range were obtained using FTIR spectroscopy. The band emissivity ε values of VO₂/Si films were calculated according to Kirchhoff's law by integrating the spectral emissivity ε_λ over the blackbody radiation spectra for the given spectral range and temperature (fig. 2).

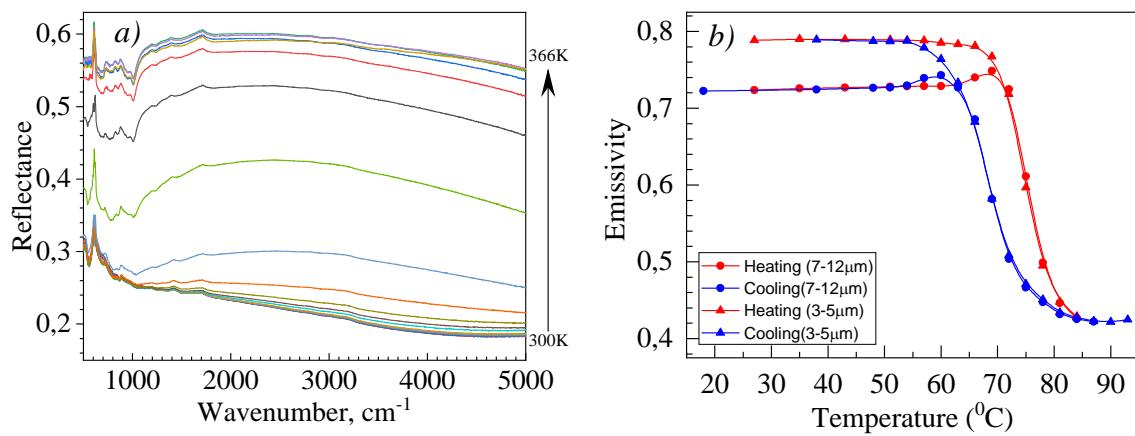


Fig. 2. a) FTIR reflection spectra of VO₂ films on Si substrates acquired during heating from 300 to 366 K (27 to 93 °C), b) Temperature dependence of emissivity for the non-implanted VO₂ thin film, calculated from FTIR spectroscopy data.

Consistent with infrared thermography results, FTIR measurements confirmed pronounced, phase transition-induced hysteresis behavior in the infrared emissivity of the VO₂/Si films. In the implanted VO₂/Si films, Ar⁺ implantation led to a broadening of the hysteresis loop and a reduction in the phase transition temperature, both of which were dependent on the implantation dose. Somewhat lower emissivity values recorded by the thermal camera may be attributed to the fundamental physical principles underlying the measurement techniques - emitted power in thermal imaging versus infrared reflectance/transmittance in FTIR spectroscopy - as well as the influence of the silicon substrate, which likely affects the overall reflectance and transmittance of the system. The results demonstrate that Ar⁺ ion implantation of VO₂ thin films enables effective control of the infrared emissivity over a wide temperature range, highlighting their potential for application in advanced infrared adaptive systems. This study was supported by NRFU project #2023.04/0026.

- O.F. Kolomys, D.M. Maziar, V.V. Strelchuk, P.M. Lytvyn, V.P. Melnik, B.M. Romanyuk, O.Y. Gudymenko, O.V. Dubikovskyi, O.I. Liubchenko, O.A. Kulbachinskiy, Effect of structural distortion on the metal-insulator transition in Ar⁺-implanted VO₂ thin films, Thin Solid Films 793 (2025) 140643. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2025.140643>

Вплив різних доз електронного опромінення на електричні властивості вздовж шарів n-InSe

I.В.Мінтянський¹, В.Т.Маслюк², П.І.Савицький¹

¹ Чернівецьке відділення Інституту проблем матеріалознавства НАН України,
Чернівці, Україна

² Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна

Висока електронна рухливість, досконалість і велика площа поверхонь сколу та практична відсутність на них розірваних зв'язків, рівномірна товщина сколотих пластин, висока фоточутливість та екстремальна гнучкість зумовлюють підвищений інтерес до вивчення шаруватих монокристалів InSe.

Відомо, що експлуатаційні параметри приладів, що базуються на кристалах кремнію, германію, арсеніду галію та їх оксидних ізолюючих шарах, різко погіршуються при інтенсивному високоенергетичному опроміненні. Вакантний міжшаровий простір в InSe є місцем стоку власних та індукованих зовнішніми впливами дефектів. Значна їх кількість (до 10^{18} см^{-3}) є тим фоном, що нівелює вплив радіації і зумовлює підвищену стійкість до β -, γ -, нейtronного та протонного опромінень і актуалізує відповідні дослідження.

В цьому повідомленні представлено дослідження впливу різних доз високоенергетичного електронного опромінення на електричні властивості n-InSe при проходженні постійного струму вздовж шарів. Вперше порівнюються та аналізуються властивості монокристалів з однаковою накопиченою дозою e -впливу, але різним послідовним опроміненням.

Отримані вертикальним методом Бріджмена із нестехіометричного розплаву $\text{In}_{1,03}\text{Se}_{0,97}$ кристали належать до γ -політипу і мають деяку кількістю e -включень. Їх опромінення швидкими електронами (10 МeВ) проводилося на мікротроні М-30. Один зразок послідовно опромінювався дозами у 30, 90 та 150 кГр, а інший – тричі по 90 кГр, тобто сумарна накопичена доза була однаковою (270 кГр). Енергетичні втрати для зразків не перевищували 10 % і тому вважалося, що генерація радіаційних дефектів майже рівномірна по всьому їх об’єму.

Для кристалів з однаковими вихідними параметрами при постійних струмі та магнітному полі вимірювалися температурні (80÷400 К) залежності електропровідності вздовж шарів $\sigma_{\perp C}$ та коефіцієнта Холла R_H . Всі виміри до та після опромінення виконувалися на тих же зразках без перепаування контактів. Встановлено, що після першого опромінення кристалів незалежно від дози (30 чи 90 кГр) низькотемпературна концентрація електронів різко понижується (більш як порядок). Подальший e -вплив тільки незначно зменшує значення n і для зразків з максимальною дозою концентрація при 80 К відрізняється менше, ніж вдвічі. Пониження n пов'язане з «металізацією» значної частини міжвуз-

ловинного індію у міжшарових просторах після радіаційного впливу.

При найнижчій дозі опромінення (30 кГР) низькотемпературна рухливість електронів $\mu_{\perp C}$ зростає на $\approx 80\%$, що зумовлено пониженнем концентрації нейтральних розсіюючих центрів. Таке покращення якості сelenіду індію не спостерігалося при будь-яких інших впливах (легування, інтеркаляція, термообробка тощо). Подальше зростання накопиченої дози приводить до падіння $\mu_{\perp C}$ до $\sim 90 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ при 80К.

Характерні екстремуми на температурних залежностях R_H та $\mu_{\perp C}$ для зразка 1Е3 при накопиченій дозі у 270 кГр (рис. 1) пояснені на основі 2D-3D моделі. Вважалося, що при низьких температурах домінують 2D електрони з пониженою рухливістю, а немонотонні зміни у проміжній об-

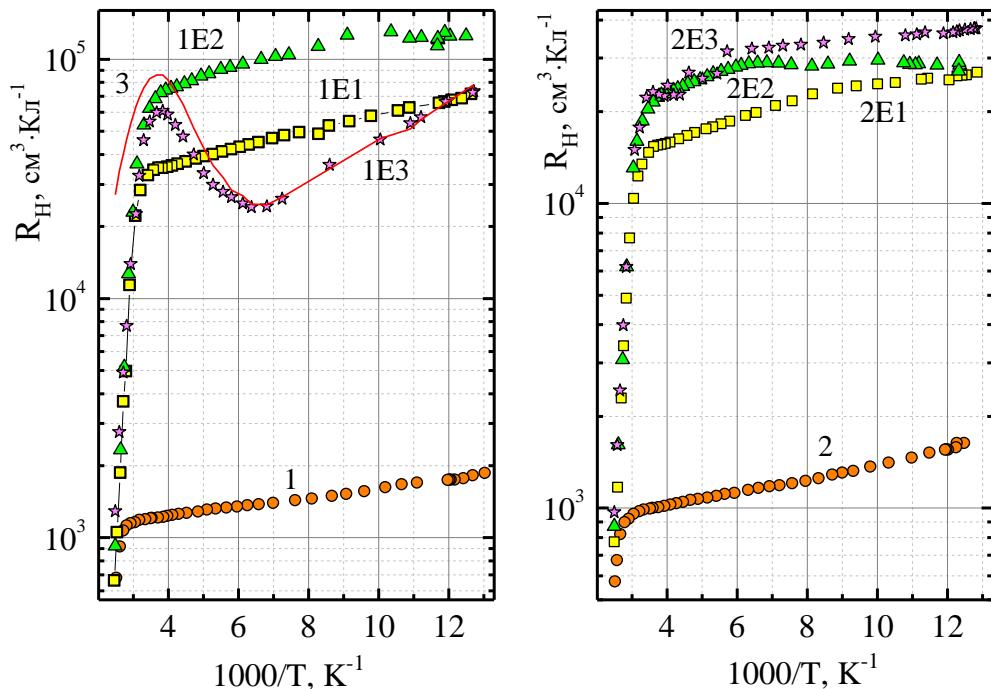


Рис. 1. Температурні залежності R_H для вихідних (1, 2) та послідовно опромінених електронами (1Е1÷1Е3 і 2Е1÷2Е3) зразків *InSe*. 3 – розрахований коефіцієнт Холла.

ласті пов'язані з їх активацією в зону провідності з більшою рухливістю. Визначена з $\mu_{\perp C}(T)$ -залежності концентрація 3D-електронів проаналізована в моделі «один донор - один акцептор». Показано, що зразок 1Е3 є сильно компенсованим напівпровідником ($N_A/N_D=0,966$) з концентрацією донорів $N_D=2,916\cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, а енергія активації тривимірної провідності складає 168 меВ.

Для кристалів з 2D електронами, що рухаються тільки вздовж шарів і не беруть участі в перенесенні заряду через шари, анізотропія провідності мала б бути значною. Додаткові експерименти підтвердили, що після e -опромінення зразків $\sigma_{\perp C}/\sigma_{||C}$ істотно зростає по величині та експоненційно змінюється з температурою, що в основному зумовлено особливостями зміни поперечної до шарів компоненти $\sigma_{||C}$.

Вплив механічних напружень на швидкість розпилення наноструктур

О. Оберемок, О. Єфремов, В. Єшан, О. Косуля, В. Федулов, О. Пантелеєв
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України,
пр. Науки, 41, 03028, Київ, Україна, ober@isp.kiev.ua

Багатошарові нанорозмірні структури широко використовуються в якості дифузійних бар'єрів, світло випромінюючих приладів, оптичних фільтрів та модуляторів, елементів Х –променевої оптики, тощо. Відповідність передбачених та реальних просторових розподілів концентрацій домішок на границях розділу шарів в таких нанорозмірних структурах часто є ключовою характеристикою дієздатності приладів. Одним із методів визначення розподілу домішок в таких структурах є вторинна іонна мас-спектрометрія (BIMC). Метод використовує процес іонно-променевого розпилення матеріалу для формування вторинних іонних струмів, які характеризують досліджуваний об'єкт. Було встановлено, що швидкість розпилення матеріалів в деяких надгратках змінюється в процесі аналізу просторового розподілу домішок [1]. Поверхневі шари структури розпилюються швидше ніж ті що знаходяться в глибині. Це призводить до недостовірності визначення просторового розподілу домішок і відповідно похибок в визначенні фізичних параметрів приладів. Однією з причин таких змін можуть бути великі механічні напруження, які призводять до зміни коефіцієнту розпилення матеріалу. Нами було проведено модельний експеримент по розпиленню напруженого і ненапруженого кремнію. Механічні напруження вводились в зразок шляхом циліндричного вигину кремнієвої пластини.

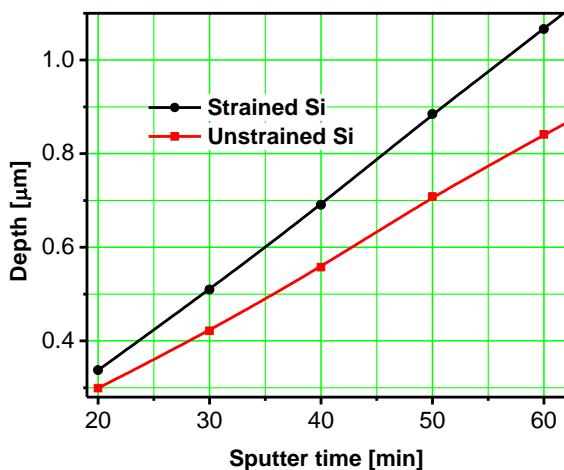


Рис.1. Залежність глибини утворюваних кратерів від часу розпилення в ненапруженому і напруженому кремнії.

З рисунку 1 приведено залежності зміни глибині кратеру від часу розпилення. Видно, що швидкість розпилення зразка збільшувалась при напруженнях, які перевищували межу міцності матеріалу. Тобто, коли

пружна деформація переходила в пластичну. На рисунку 2 приведено розподіл механічних напружень (розврахований в CONSOL Multiphysics) в околі (а) та вздовж стінок (б) кратера, які утворюються в процесі розпилення напруженого кремнію. Видно, що в околі кратера є місця з великими механічними напруженнями розтягу та стиснення. Ці напруження зростають в процесі розпилення утворюючи так званий концентратор напружень. При перевищенні межі міцності матеріалу в області стиснення, надлишок атомів кремнію в кристалічній гратці буде витіснитися за межі кристалічної гратки. Припускається, що це призведе до утворення деформаційно – стимульованих потоків слабко зв'язаних з об'ємом матеріалу атомів, які будуть дифундувати в область розтягу матеріалу. В цьому випадку, витіснення атомів в області розтягу повинно призвести до компенсації частини втрачених атомів в процесі розпилення. Внаслідок цього, області розтягу в кратері повинні розшилюватися гірше ніж решта кратеру. Останнє спостерігалося на експерименті.

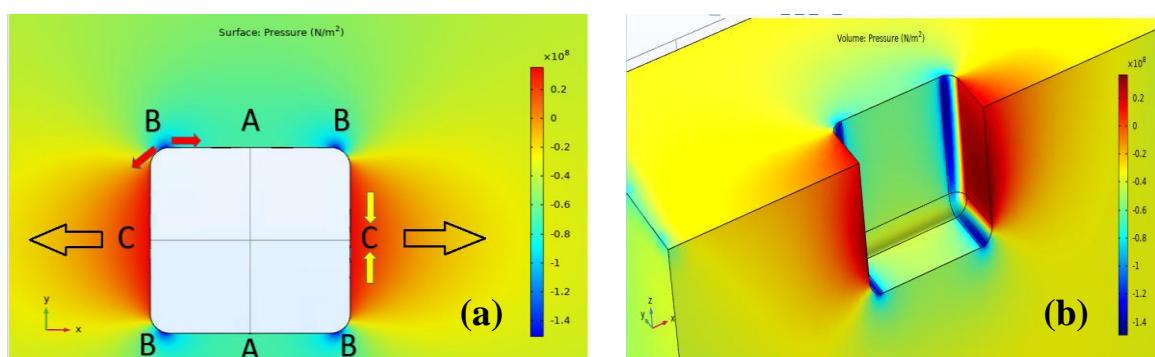


Рис.2. Розподіл механічних напружень навколо (а) та в середині (б) утвореного кратера в напруженому Si

Отже, проведені розрахунки, моделювання та експерименти показали, що збільшення коефіцієнту розпилення кремнію при формуванні кратеру іонним пучком обумовлено появою деформаційно – стимульованих потоків слабко – зв'язаних атомів витіснених з області стиснення матеріалу.

Нами було досліджено розподіл компонент в багатошарових Mo/Si надгратках методом BIMC. Методами Х – променевої дифракції було показано, що в таких структурах мають місце великі механічні напруження, які зростають з збільшенням кількості періодів надгратки. Останнє корелює з зміною швидкості розпилення по глибині структури.

Ми пропонуємо оригінальну фізичну модель зміни коефіцієнта розпилення періоду Mo/Si надграток в процесі BIMC аналізу.

1. O. Liubchenko, T. Sabov, V. Kladko, V. Melnik and other, Applied Nanoscience, 2019, (8), p.p. 2479-2487, <https://doi.org/10.1007/s13204-019-01000-w>

Польові транзистори на основі плівки відновленого оксиду графену для реєстрації іонізуючого випромінювання

I.Б. Оленич, Л.С. Монастирський, Б.С. Соколовський, Б.І. Турко, О.С. Дзендерлюк

Львівський національний університет імені Івана Франка

вул. Драгоманова, 50, м. Львів, 79005, Україна

Обладнання для виявлення, ідентифікації та вимірювання іонізуючого випромінювання є ключовим компонентом безпечного та відповідального розвитку ядерної науки, космічних досліджень, медицини тощо. Впровадження нових технологій дає змогу вдосконалувати відомі системи радіаційного моніторингу, робити їх більш компактними та дешевими, зменшити споживану потужність, що відповідає сучасним парадигмам, як от Інтернет речей (ІоТ) [1]. Зокрема, як портативні радіаційні детектори використовують р-і-п-діоди та МОН-польові транзистори з оптимізованою структурою або пристрої на основі наноматеріалів. Проте, через малий об'єм наноматеріалів виникає необхідність реєстрації одиночних високоенергетичних частинок або квантів. Зважаючи на це, високий потенціал для застосування у радіаційних детекторах мають графенові польові транзистори завдяки високій чутливості біполярної провідності графену поблизу точки Дірака до зміни локального електричного поля генерованих радіацією зарядів [2]. У цьому випадку кремнієва підкладка слугує одночасно затвором польового транзистора і поглиначем іонізуючого випромінювання. Утворення радіаційних дефектів у шарі діелектрика як центрів захоплення вільних носіїв заряду може спричиняти додатковий вплив на провідність плівки графену. Крім того, від якості підзатворного діелектрика залежить ефективність графенових польових транзисторів [3, 4]. Тому у роботі досліджено можливість використання різних типів діелектричних шарів для створення радіаційних детекторів на основі графенового польового транзистора.

Як підкладку для графенового польового транзистора використано слаболеговані кремнієві пластини, на поверхню яких методом ВЧ-магнетронного напилення в атмосфері аргону було осаджено шари SiO_2 , Al_2O_3 та Hf товщиною 150–200 нм. Шар Hf був додатково окиснений на повітрі при температурі 1000°C упродовж 1 год. На поверхню діелектричних шарів наносилась плівкоутворювальна суспензія відновленого оксиду графену (RGO), після висушування якої було отримано провідний канал польового транзистора. Як електроди стоку і витоку використовувалися срібні контакти, термічно напилені на поверхню плівки RGO.

Експериментально встановлено, точка нейтральності заряду (точка Дірака) польових транзисторів на основі плівки RGO знаходиться в діапазоні напруг затвора 0,4–2,8 В (Рис. 1). Положення точки Дірака і

нахил діркової та електронної частин залежності опору плівки RGO від напруги затвора V_G залежить як від природи діелектричного шару, так і від електричного поля локалізованих зарядів [3]. Якість діелектричного шару також визначає характер $C-V$ -залежностей отриманих МДН-структур, адже мінімальне значення C/C_{max} у разі однакової кремнієвої підкладки визначається поверхневим зарядом, пов'язаним з електрично активними дефектами у діелектричному шарі (Рис. 2). Після опромінення експериментальних структур від джерела ^{226}Ra упродовж 24 годин спостерігалася трансформація $C-V$ -характеристик.

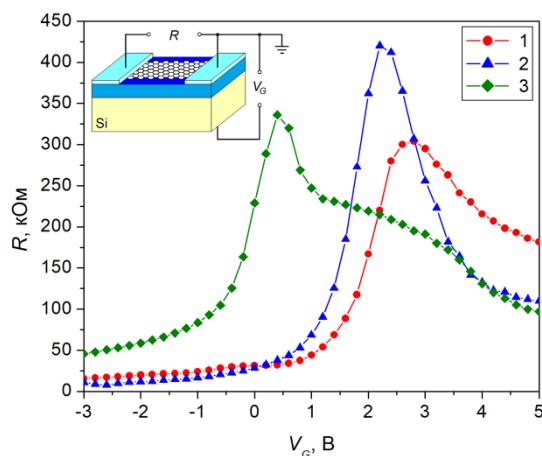


Рис. 1. Залежність опору польових транзисторів на основі плівки RGO з діелектричним шаром SiO_2 (1), Al_2O_3 (2), HfO_2 (3) від напруги затвора V_G . На вставці – схема польового транзистора.

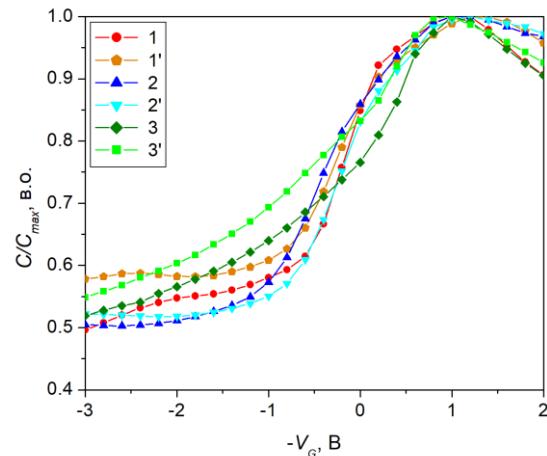


Рис. 2. $C-V$ -характеристики польових транзисторів на основі плівки RGO з діелектричним шаром SiO_2 (1,1'), Al_2O_3 (2,2'), HfO_2 (3,3') до (1,2,3) і після (1',2',3') опромінення ізотопом ^{226}Ra .

Аналіз отриманих результатів вказує на те, що найвищою ефективністю характеризується польовий транзистор на основі плівки RGO з діелектричним шаром Al_2O_3 . Натомість оптимальною для графенових радіаційних детекторів є структура з шаром SiO_2 , оскільки для неї спостерігається найбільша радіаційно-індукована зміна відношення мінімальної ємності до максимальної.

- [1] Roman-Raya J., Ruiz-Garcia I., Escobedo P., Palma A. J., Guirado D., Carvajal M. A. // Sensors. – 2020. – **20**. – P. 1568.
- [2] An H., Li D., Yang S., Wen X., Zhang C., Cao Z., Wang J. // Sensors. – 2021. – **21**. – P. 7753.
- [3] Olenych I. B., Horbenko Y. Y., Sokolovskii B. S. // Mol. Cryst. Liq. Cryst. – 2024. – **768**. – P. 426–435.
- [4] Touski S. B., Hosseini M. // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. – 2020. – **116**. – P. 113763.

Optimization of the reflectivity of two-layer macroporous silicon.

V.F. Onyshchenko, L.A. Karachevtseva

V.Ye. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, 41 Nauki Ave., Kyiv, 03028, Ukraine, E-mail: onyshchenkovf@isp.kiev.ua

Macroporous silicon has lower reflectance than single crystal silicon, so it has found applications in photodetectors, solar cells, and sensors [1]. The absorption of bilateral macroporous silicon and nanowires increases due to the increase in the optical path of light [2]. The effective lifetime of bilateral macroporous silicon depends on the depth of the macropores and the surface recombination velocity [3].

The reflectance of two-layer macroporous silicon is optimized. The reflectance of two-layer macroporous silicon is found when the volume fraction of pores of each porous silicon layer is changed. Macroporous silicon layers with different porosity have different macropore diameters, but the same distance between the centers of the macropores. The minimum reflectance of two-layer macroporous silicon is found using gradient descent. The reflectance of two-layer macroporous silicon is compared with the reflectance of a one-layer macroporous silicon and monocrystalline silicon. The porosity of each macroporous silicon layer is found at which the reflectance of two-layer macroporous silicon is greater or less than the reflectance of one-layer macroporous silicon and the reflectance of monocrystalline silicon.

The figure shows the reflection of light with a wavelength of 0.9 μm by two-layer porous silicon depending on the porosity of each layer of porous silicon. The reflection by two-layer porous silicon is shown by curves with the same reflection at different porosities of the macroporous silicon layers. The thickness of the two layers together is 1 μm . The macroporous silicon layers are considered effective media. The complex effective refractive index of the effective medium is used. The calculations take into account multiple reflections from the surfaces of the monocrystalline substrate and the macroporous silicon layers.

The figure shows that the lowest reflectance of two-layer macroporous silicon is 0.124. It is observed when the porosity of the first porous layer is 0.5 and the second is 0.8. The lowest reflectance of one-layer macroporous silicon (the porosity of both layers is the same) is 0.178. It is observed when the porosity is 0.65. With different porosity, two-layer macroporous silicon has a reflectance greater or less than that of single-crystal silicon and one-layer macroporous silicon. The figure shows that the reflectance of two-layer macroporous silicon is less than that of one-layer macroporous silicon if the porosity of the first layer of macroporous silicon is greater than 0.8, or the

porosity of the second layer of macroporous silicon is less than 0.5. There is a large range of porosity values of each layer of macroporous silicon at which the reflectance of two-layer macroporous silicon is greater than that of one-layer macroporous silicon.

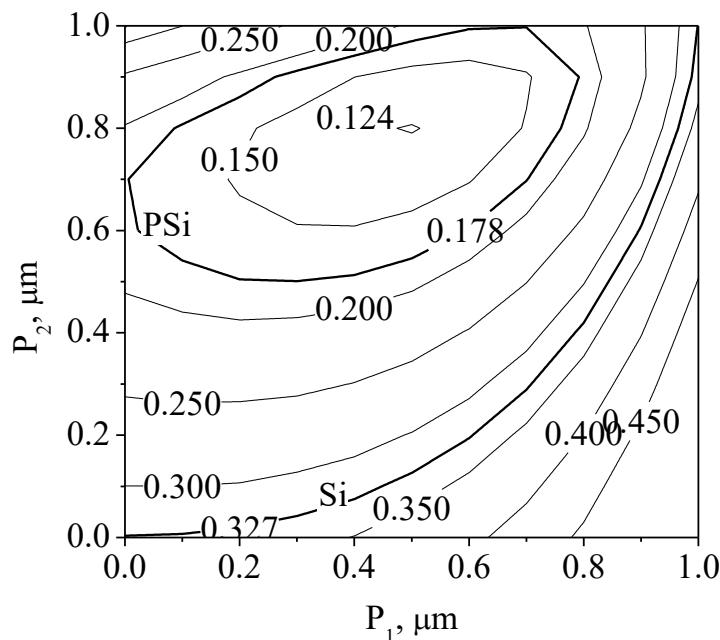


Fig. Dependence of the reflectance of two-layer macroporous silicon on the porosity of each layer of macroporous silicon. The reflectance of two-layer macroporous silicon is equal to single crystal silicon (Si), one-layer macroporous silicon with optimized porosity (PSi).

Two-layer porous silicon has lower reflectance than single-crystal silicon and one-layer macroporous silicon with optimized porosity, due to optimization of the porosity of the porous silicon layers. Two layers of macroporous silicon reflect less than a single layer or flat surface of silicon. This is due to the smaller difference in refractive indices on both sides of the outer and inner surfaces of two-layer macroporous silicon.

1. L.A. Karachevtseva, O.O. Lytvynenko, V.F. Onyshchenko, O.Yu. Sapelnikova. Photonic structures of macroporous silicon / Ed. L.A. Karachevtseva. – Kyiv: Interservice, 2024. – 260 pp.: 154 ill. (in Ukrainian).
2. V.F. Onyshchenko Transmission and Absorption of Bilateral Porous Silicon with Macropores or Nanowires. J. Nano- Electron. Phys. – 2024. – V. 16, N 2. P. 02008–7. [https://doi.org/10.21272/jnep.16\(2\).02008](https://doi.org/10.21272/jnep.16(2).02008).
3. V.F. Onyshchenko Effective minority carrier lifetime in double-layer macroporous silicon. J. Nano- Electron. Phys. – 2024. – V. 16, N 4. P. 04026–7. [https://doi.org/10.21272/jnep.16\(4\).04026](https://doi.org/10.21272/jnep.16(4).04026).

Magnetic and Thermal Characteristics of CaFeO₂ Nanoparticles under Alternating Magnetic Fields

T. Polek¹, A. Bodnaruk², V. Kalita^{2,3}, S. Ryabchenko², A. Tovstolytkin¹

V. G. Baryakhtar Institute of Magnetism, NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine;

Institute of Physics, NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine;

National Technical University of Ukraine Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute', Kyiv, Ukraine;

Magnetic hyperthermia has emerged as a promising approach for localized cancer treatment, utilizing magnetic nanoparticles (MNPs) to convert electromagnetic energy into heat under an alternating magnetic field (AMF) [1]. Commonly studied materials include iron oxides, spinel ferrites, and perovskite-based manganites, which have demonstrated varying levels of heating efficiency and biocompatibility [2]. Among these, delafossite-type compounds such as NaFeO₂ and CaFeO₂ are gaining attention due to their layered structure, tunable magnetic interactions, and favorable thermal properties. In this study, we investigate CaFeO₂ as an alternative ferrite system for hyperthermia applications.

CaFeO₂ nanoparticles were synthesized using the sol-gel method and thermally treated to achieve crystallinity. Magnetic characterization revealed a notable temperature dependence of magnetization. Hysteresis loops measured at different temperatures indicated a transition from ferromagnetic to superparamagnetic behavior, with the coercive field decreasing from 58 Oe at 100 K to nearly zero at 250 K. The temperature dependence of saturation magnetization M_s(T) followed a power-law model, with a critical exponent $\beta \approx 0.31$ and a Curie temperature estimated at approximately 625 K. These values are in agreement with theoretical predictions and previous studies on related delafossite compounds [3]. Calorimetric studies were conducted using aqueous ferrofluids containing CaFeO₂ nanoparticles at different concentrations (25–75 mg/mL). Exposure to AMF (300 kHz, up to 110 Oe) revealed a threshold-like heating behavior, with noticeable temperature increase starting from a field amplitude of 65 Oe. The specific loss power (SLP) increased with both field amplitude and particle concentration, reaching values above 30 W/g at the highest tested parameters. These results suggest that CaFeO₂ combines effective energy dissipation with temperature-controlled magnetic response, making it a viable candidate for biomedical hyperthermia applications.

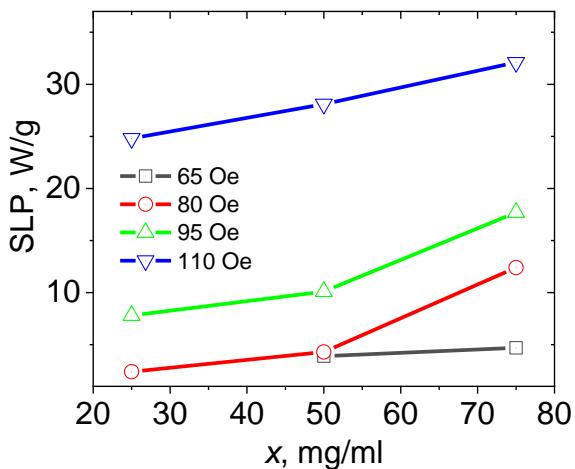


Fig. 1. Specific loss power (SLP) versus CaFeO_2 concentration at different AMF amplitudes.

The magnetization curves $M(H)$ recorded at various temperatures demonstrated typical behavior for nanoscale magnetic materials, with noticeable hysteresis at low temperatures and narrowing loops as the temperature increased. The suppression of coercivity at elevated temperatures confirmed the thermally activated transition toward a superparamagnetic regime, which is beneficial for biomedical applications due to the absence of magnetic remanence. These findings underline the importance of structural features and magnetic ordering in determining the thermal response under AMF exposure. In contrast to conventional iron oxide nanoparticles, CaFeO_2 offers a combination of structural stability and enhanced heating characteristics, while maintaining low-field operational thresholds. Moreover, the use of calcium is a biologically compatible element further improves the safety profile of this material for *in vivo* applications.

References:

1. V. M. Kalita, A. I. Tovstolytkin, S. M. Ryabchenko, O. V. Yelenich, S. O. Solopan, and A. G. Belous, *Physical Chemistry Chemical Physics* **17**, 18087 (2015).
2. Y. Shlapa, M. Kulyk, V. Kalita, T. Polek, A. Tovstolytkin, J.-M. Greneche, S. Solopan, and A. Belous, *Nanoscale Res Lett* **11**, (2016).
3. O. I. Nakonechna, G. S. Lotey, J. Kaur, A. V. Bodnaruk, V. M. Kalita, Y. Y. Shlapa, S. O. Solopan, and A. I. Tovstolytkin, *Particle and Particle Systems Characterization* **39**, (2022).

Potential barrier in a two-layer porous structure based on ZrO_2 and $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{19}\text{Si}_6$ which filled with electrolyte (H_2O).

V.V. Ponomarenko¹, Yu.Yu. Bacherikov^{1,2*}, A.Z. Sadigov^{3,4}, O.B. Okhrimenko¹, A.G. Zhuk¹, F.I. Ahmadov^{3,4}, I.A. Danilenko⁵, A.I. Lyubchyk^{6,7}, S.I. Lyubchyk^{6,7}.

¹*V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 41 Nauky Avenue, 03028 Kyiv, Ukraine*

²*V. Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry, NAS of Ukraine, 32/34 Academician Palladin Avenue, 03142 Kyiv, Ukraine*

³*Institute of Radiation Problems- Ministry of Science and Education, B. Vahabzade Str. 9, Baku AZ1143, Azerbaijan*

⁴*Department of Nuclear Research of IDDA, Baku Shamakhy HW 20 km, Gobusett. of Absheron dist., Baku AZ 0100, Azerbaijan*

⁵*O. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering, NAS of Ukraine, 46 Nauky Avenue, 03028 Kyiv, Ukraine*

⁶*REQUIMTE, NOVA School of Science and Technology, University New of Lisbon, Caparica 2829-516, Portugal*

⁷*DeepTechLab, RCM2+. Universidade Lusófona, Campo Grande, 376, Lisboa 1749-024, Portugal*

The emergence of the new approaches to obtaining the environmentally friendly electric power using dispersed systems with ionic conductivity, which to some extent reproduce the functions of semiconductor structures and nanostructures and are capable of generating electric power, suggests that such structures and designs based on them can serve as some alternative to solar panels in autonomous power supply systems.

Currently, the development of structures capable of generating electric power by interaction with moisture is at a preliminary stage. Of particular interest are heterostructures based on dispersed systems with a highly developed interface, as well as various processes occurring in these systems in the surface layer of the interface and in the dispersion medium.

In this work, changes in the current-voltage characteristics (stability of the potential barrier in a dispersed medium) in the two-phase dispersed system $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{19}\text{Si}_6 + \text{ZrO}_2$, which is obtained by pressing two layers of compacted particles in the form of pressed tablets of ZrO_2 and xonotlite ($\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{19}\text{Si}_6$), after saturation with electrolyte (H_2O) depending on time was investigated.

Fig. 1 *a-c* shows the current-voltage characteristics of the $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{19}\text{Si}_6 + \text{ZrO}_2$ structure, which were obtained at different time intervals after saturation of the structure with moisture.

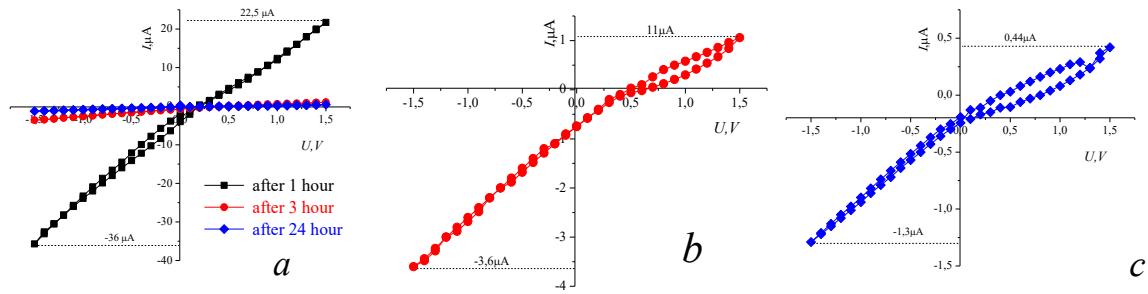


Fig. 1. I-V characteristics of the structure $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{19}\text{Si}_6+\text{ZrO}_2$ *a* - after 1, 3 and 24 hour, *b* - after 3 hours, *c* - after 24 hours after saturation of the structure with moisture.

As can be seen from the data presented in Fig. 1, the volt-ampere characteristic of the $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{19}\text{Si}_6+\text{ZrO}_2$ structure an 1 hour after its saturation with moisture (Fig. 1, *a*) has a weakly expressed asymmetrical appearance relative to the "0" potential, while the rectification coefficient of the structure is 1.65. For the *I*-*V* characteristics of the structure measured after 3 and 24 hours, the rectification coefficients are values of the order of 3.2 \div 3.3 (Fig. 1, *a-c*). In this case, the current flow in the $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{19}\text{Si}_6+\text{ZrO}_2$ structure drops sharply over time. After 3 hours, almost 10 times, and after another 24 hours - nearly 30 times compared to the current which flow in it an 1 hour after its saturation with moisture (Fig. 1, *a*). Such behavior is probably due to the specifics of the electrolyte (dispersed medium) which filling the structure. In this case, it is distilled water, so the mobile ions from different layers of the structure (OH^- and $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$) can be restored to neutral water molecules when interacting, which in turn leads to a sharp decrease in the number of mobile charge carriers in the entire structure and an increase in its resistance. In other words, this structure acts as a device capable of deionizing water, converting it from an electrolyte state to a dielectric state.

Thus, the using of several composite materials (dispersed systems), each of which consists of a porous matrix (dispersed phase) filled with an electrolyte (dispersed medium), due to differences in the properties of the matrix, makes it possible to obtain structures in which a potential barrier in the electrolyte medium, determining the parameters of the movement of ions of a certain sign (anions or cations) through such structures is formed.

In addition, the $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{19}\text{Si}_6+\text{ZrO}_2$ structure which obtained by bringing two layers of $\text{Ca}_6\text{H}_2\text{O}_{19}\text{Si}_6$ and ZrO_2 into contact by pressing can be used as a device which capable of deionizing water and converting it from an electrolyte state to a dielectric state.

Резонансне тунелювання крізь подвійний потенціальний бар'єр в графені

Сахнюк П.В., Замуруєва О. В., Сахнюк В. Є.

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

Унікальні електронні властивості графену, а особливо незвичайні транспортні явища, зумовлені діраківською природою його носіїв заряду. Одним з таких явищ є кляйнівське тунелювання – здатність релятивістських частинок (включно з електронами в графені) проходити крізь високі потенціальні бар'єри, для певних кутів падіння, з ймовірністю одиниця [1,2]. Це явище суттєво відрізняється від тунелювання нерелятивістських частинок, що описуються рівнянням Шредінгера, де ймовірність проходження експоненційно спадає зі збільшенням висоти та ширини бар'єра.

Метою даної роботи є теоретичне дослідження кляйнівського тунелювання електронів крізь симетричний подвійний потенціальний бар'єр прямокутної форми в графені, отримання аналітичного виразу для коефіцієнта проходження та формулювання аналітичних умов для резонансного тунелювання.

Рух електронів у графені описується ефективним рівнянням Дірака для безмасових ферміонів [3]:

$$(-i\hbar v_F \sigma \nabla + V(x))\psi = E\psi, \quad (1)$$

де ψ – двокомпонентна хвильова функція, E – енергія електрона, v_F – швидкість Фермі, σ – матриці Паулі, $V(x)$ – електростатичний потенціал.

Симетричний подвійний потенціальний бар'єр прямокутної форми задається потенціалом

$$V(x) = V_0[H(-x - a)H(x + a + d) + H(x - a)H(-x + a + d)]$$

де V_0 – висота бар'єрів, d – ширина кожного бар'єра, $2a$ – відстань між бар'єрами.

Рівняння Дірака (1) розв'язується в кожній з п'яти однорідних областей, на які поділяється простір по осі oX потенціальним бар'єром. Хвильові функції в областях I та V відповідають падаючій, відбитій (r) та хвилі, що пройшла бар'єр (t), тоді як в областях II, III, IV описуються суперпозицією хвиль, що поширюються в протилежних напрямках. При розв'язанні враховується збереження компоненти хвильового вектора, паралельної до бар'єрів ($k_y = q_y$).

Коефіцієнти відбиття $R = |r|^2$ та проходження $T = |t|^2$ знаходяться шляхом зшивання хвильових функцій на чотирьох границях розділу $x = \pm(d + a)$, $x = \pm a$ з використанням умов неперервності. Це приводить до системи восьми лінійних рівнянь, розв'язання якої дозволяє отримати аналітичні вирази для амплітуд r та t .

В результаті розв'язання системи рівнянь отримано аналітичний вираз для коефіцієнта проходження T електронів крізь симетричний подвійний потенціальний бар'єр:

$$T = \left[1 + 4\sin^2(q_x d) \frac{(S\sin\theta - S'\sin\varphi)^2}{\cos^2\theta\cos^2\varphi} \left(\sin(2k_x a)\sin(q_x d) \frac{\sin\varphi\sin\theta - S'S}{\cos\theta\cos\varphi} \right. \right. \\ \left. \left. + \cos(2k_x a)\cos(q_x d) \right) \right]^2,$$

де φ – кут падіння, θ – кут заломлення всередині бар'єра, k_x та q_x – компоненти хвильового вектора поза та всередині бар'єра відповідно, $S = sign(E)$, $S' = sign(E - V_0)$.

Ця формула дозволяє безпосередньо визначити умови, за яких відбувається резонансне тунелювання, тобто $T = 1$. Таких умов виявлено три:

1. $\sin(q_x d) = 0$, або $q_x d = \pi n, n = 0, \pm 1, \dots$

Умова пов'язана з формуванням резонансних станів всередині кожного з бар'єрів. Вона залежить від енергії електрона, висоти (V_0) та ширини (d) бар'єрів, але не залежить від відстані між ними ($2a$). Аналогічна умова існує і для одиночного бар'єра [3, 4].

2. $S\sin\theta - S'\sin\varphi = 0$.

Ця умова задовольняється, зокрема, при нормальному падінні ($\varphi = 0$), що забезпечує ідеальне проходження незалежно від параметрів системи завдяки збереженню псевдоспіну та забороні розсіяння назад. Ця умова також аналогічна умові для одного бар'єра.

3. $\sin(2k_x a)\sin(q_x d) \frac{\sin\varphi\sin\theta - S'S}{\cos\theta\cos\varphi} + \cos(2k_x a)\cos(q_x d) = 0$.

Дана умова є специфічною для двобар'єрної структури. Вона залежить від усіх параметрів системи, включаючи відстань між бар'єрами $2a$. Саме ця умова відповідає за появу додаткових резонансних піків проходження, відсутніх у випадку одиночного бар'єра.

Порівняльний аналіз коефіцієнта проходження для одиночного та подвійного бар'єрів в графені при одинакових параметрах E, V_0, d (та $2a = d$ для подвійного бар'єра) наочно демонструє появу додаткових кутів φ , при яких $T = 1$, зумовлених третьою умовою резонансу. Розрахунки конкретних значень резонансних кутів для $E = 83$ мeВ, $d = 100$ нм, $a = 100$ нм при $V_0 = 200$ мeВ та $V_0 = 285$ мeВ підтверджують результати, отримані з аналітичних умов резонансного тунелювання. Показано, що зі зменшенням висоти бар'єра V_0 кількість резонансних кутів зростає, а самі резонанси стають гострішими.

Отримані результати поглиблюють розуміння механізмів електронного транспорту в багатобар'єрних графенових структурах і можуть бути корисними для проєктування графенових електронних пристройів, що використовують ефекти резонансного тунелювання.

1. O. Klein, Z. Phys. 53, 157 (1929).
2. M. I. Katsnelson, Graphene: Carbon in Two Dimensions, Cambridge University Press (2012).
3. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009);
4. J. M. Pereira, Jr., P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, Appl. Phys. Lett. 90, 132122 (2007).

Вплив легування Ge на електричні характеристики кристалів моноселеніду індію

П.І.Савицький, І.В.Мінтянський, М.В.Товарницький

Чернівецьке відділення Інституту проблем матеріалознавства НАН України,
Чернівці, Україна

Характерна для селеніду індію самокомпенсація дефектів проявляється в тому, що нелеговані кристали InSe завжди мають *n*-тип провідності з концентрацією вільних електронів $n \sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$ при 300 К, що слабо (менше ніж вдвічі) зменшується при пониженні температури до 80 К. Як виявлено із вимірювань ефекту Холла, ця властивість зумовлена присутністю мілкого донора з енергією активації $E_D = E_C - (0,012 \pm 0,016) \text{ eV}$, дещо залежною від густини цих донорів. Оскільки діаграма стану системи In – Se веде до необхідності вирощувати кристали із розплаву з надлишком In, загальноприйнято, що ці центри зумовлені атомами міжвузельного індію In_i. В кристалі вони діють як окремі точкові дефекти, а також можуть утворювати міжшарові скupчення і впливати на рухливість носіїв, приводячи до часової нестабільності електричних характеристик.

Після відпалу нелегованих кристалів *n*-InSe у вакуумі при $T > 300 \text{ }^{\circ}\text{C}$ і навіть нагріву до 420 К при вимірюваннях було виявлено зростання концентрації *n* внаслідок генерації мілких донорів з подальшою її релаксацією до рівноваги протягом тижнів і навіть місяців. Така зміна *n* передбачає, що центр, відповідальний за власний мілкий рівень, може легко рухатися через гратку, а це характерно для міжвузельних атомів. Цікавим виглядає пошук домішки заміщення з істотно більшою енергією активації, ніж у власного донора In_i, яка здатна забезпечити *n*-тип провідності InSe і водночас усунути надлишковий In із міжшарових просторів. Такою домішкою може стати Ge, який в GaSe проявляє себе як глибокий донор і веде до $p \rightarrow n$ інверсії типу провідності.

Тут представлені дослідження електричних параметрів кристалів *n*-InSe, вирощених методом Бріджмена із нестехіометричного розплаву In_{1,03}Se_{0,97}<0,3 мас. % Ge>. Вони належать до γ -політипу із деяким вмістом ε -фази. В області 80÷400 К виміри електропровідності вздовж шарів $\sigma_{\perp C}$ та коефіцієнта Холла R_H проведено для зразків із двох різних зливків (A та B), електричні параметри яких значно відрізняються. Для зразків A при 293 К концентрація *n* становить $(4 \div 6) \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ при холлівській рухливості вздовж шарів $\mu_{\perp C} = 800 \div 900 \text{ см}^2/\text{Вс}$. Для типового зразка 1 у діапазоні 80÷400 К зміна *n* перевищує один порядок, що істотно більше, ніж в нелегованих кристалах. Рухливість $\mu_{\perp C}(T)$ визначається домінуючим гратковим розсіюванням і деяким вкладом іонного при $T < 140 \text{ K}$. При 293 К для кристалів B значення *n* та $\mu_{\perp C}$ становлять $(0,8 \div 2) \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ та $\approx 500 \text{ см}^2/\text{Вс}$ відповідно при істотно відмінній поведінці *n*(*T*) та $\mu_{\perp C}(T)$ (рис. 1).

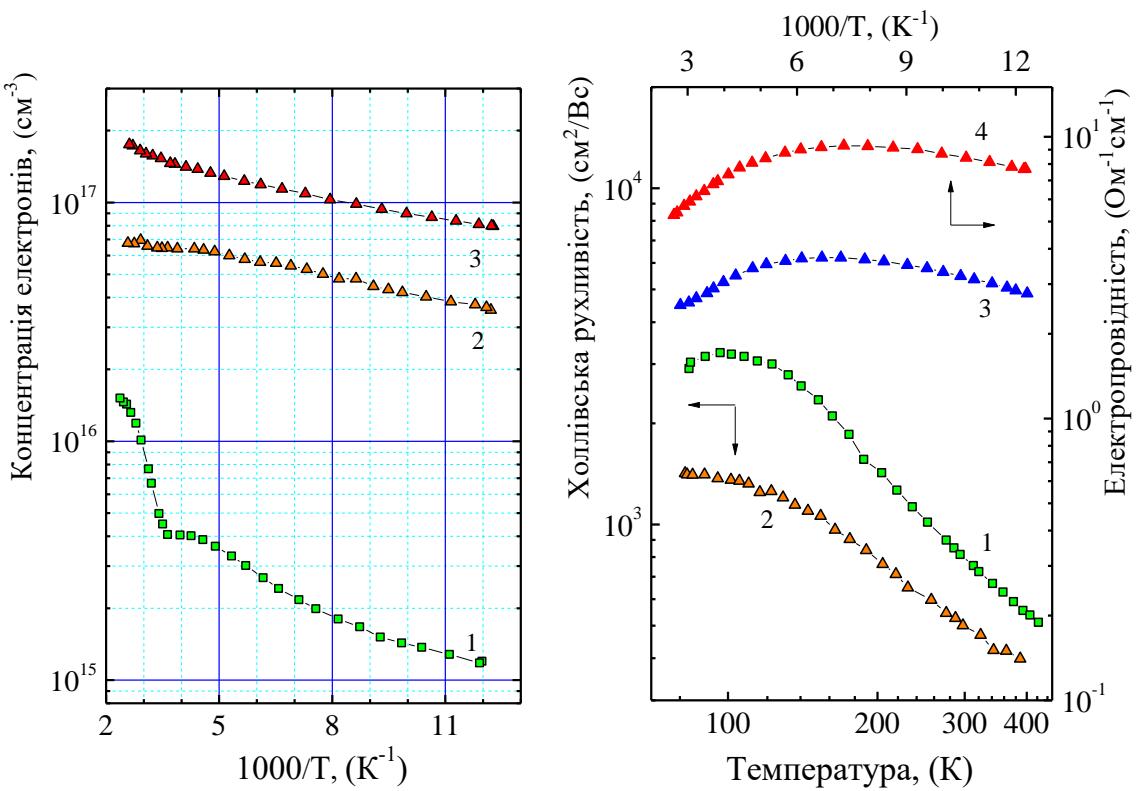


Рис. 1. Температурні залежності концентрації електронів (1 – зл. А, 2 і 3 – зл. В), холлівської рухливості $\mu_{\perp C}$ (1 – зл. А, 2 – зл. В) та електропровідності впоперек $\sigma_{||C}$ (3) та вздовж шарів $\sigma_{\perp C}$ (4) для зливка В.

Дефекти упаковки між γ -та ϵ -політіпами утворюють додатковий потенціальний бар'єр E_b для руху носіїв впоперек шарів. Тому температурна залежність анізотропії провідності набуває вигляду $\sigma_{\perp C}/\sigma_{||C} \sim \exp(E_b/kT)$, а самі значення $\sigma_{\perp C}/\sigma_{||C}$ та E_b можна розглядати як параметри досконалості зразків. Порівняння залежностей $\sigma_{\perp C}(T)$ $\sigma_{||C}(T)$ для зразків зі зливка В показує, що їх відношення становить 2,3÷2,8 і майже не залежить від температури. Така поведінка відмінна від того, що спостерігалося для n -InSe, легованого Sn та Si, де $\sigma_{\perp C}/\sigma_{||C} \approx 400$ і навіть перевищує 1000 відповідно. Із поглинання в далекій ІЧ області в таких зразках ідентифіковано електронні дипольні переходи, котрі відповідають власному донору In_i, а після відпалу при 300°C його концентрація зростає у ≈ 20 разів [1]. Це означає, що неконтрольований In все ще присутній в кристалах. Наші результати показують, що відпал InSe<Ge> навіть при 500 °C не змінює концентрацію n , на відміну від нелегованого n -InSe, де така зміна може становити декілька порядків. Тому можна вважати, що легуюча домішка Ge усуває міжузельні атоми In та веде до стабілізації електричних характеристик InSe.

1. J. Martines-Pastor e.a., J. Appl. Phys, 1993, **74**, No 5, P. 3231.

Мультиіонне розсіювання заряджених носіїв заряду на іонізованих домішках у сильно легованих напівпровідниках: від об'ємних кристалів до нанодротів

С.І. Козловський, К.Л. Коваленко, М.М. Шаран

*Інститут фізики напівпровідників імені В.Є.Лашкарьова НАН України,
03028, проспект науки, 41, Київ, Україна*

Рухливість носіїв заряду є одним з найважливіших параметрів, що визначають якість напівпровідникових приладів. Контроль щільності заряду за допомогою легування залишається потужним інструментом у виробництві напівпровідникових пристрій. Багато досліджень присвячено розрахункам рухливості при розсіюванні заряджених носіїв на іонізованих домішках як в сильнолегованих об'ємних, так і в низькорозмірних напівпровідниках. Інтерес до низькорозмірних сильнолегованих напівпровідників зумовлений їх значним потенціалом для створення потужних і високочастотних електронних пристрій. Добре відома формула Брукса-Герінга для рухливості іонізованих домішок не може бути використана для дуже низьких температур і високих концентрацій легування. Для високих концентрацій домішок ця формула дає завищене значення рухливості. Існують спроби для n-Si узгодження розрахунку з експериментом шляхом врахування двоіонного розсіювання та електронно-плазмонного розсіювання. Недоліком цих робіт є ізотропне наближення, коли ізоенергетичні поверхні електронів в долинах розглядаються як сфери. Ізотропне наближення для n-Si є занадто грубим і точність розрахунку рухливості на його основі сумнівна. Розсіювання електронів плазмонами не пояснює зменшення рухливості зі збільшенням концентрації легування в сильнолегованому n-Si, оскільки це розсіювання передбачає збільшення рухливості зі збільшенням енергії Фермі електронів.

У цьому повідомленні ми узагальнили модель двоіонного розсіювання [1] на багатоіонне розсіювання (М-іонне). На основі цієї моделі отримані аналітичні вирази для рухливості у сильно легованих 3D, 2D та 1D напівпровідниках. Розраховані залежності рухливості від концентрації легування в сильно легованих об'ємних кристалах квантових ям Si, InP, GaAs, n-In_{0.49}Ga_{0.51}P і у квантових ямах In_{0.15}Ga_{0.85}As та InN нанодротах порівнюються з експериментом. Порівняння наочно виявляє, що кількість М-іонів, які беруть участь у процесі розсіювання, залежить від ефективних мас носіїв заряду. Для

носіїв заряду з ефективними масами $m < 0.1m_0$ (m_0 - маса вільного електрона) більш вірогідним є одно- або двоіонне розсіювання. Для носіїв з більшою ефективною масою має місце три- і чотириіонне розсіювання. Обчислення рухливості n-Si проведено на основі багато долинної зони провідності з анізотропними ефективними масами електронів. Порівнянням з відомими експериментальними даними встановлено, що різниця в рухливості електронів в кристалах кремнію, легованого фосфором і миш'яком, пояснюється різницею в іонних радіусах домішок.

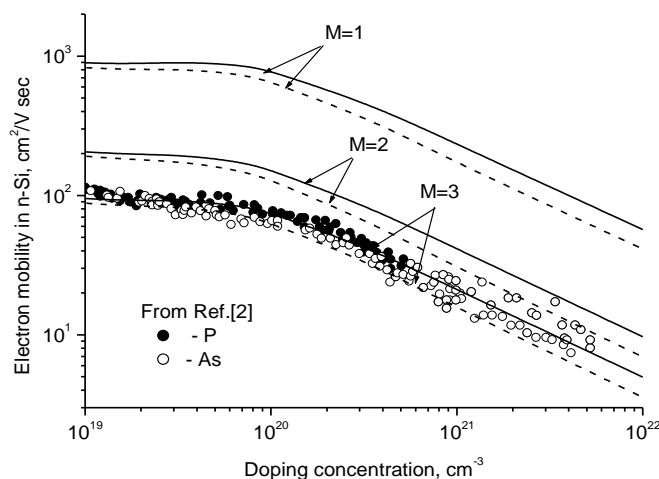


Рис.1 Експериментальна[2] (кружки) та розрахункова (лінії) залежності рухливості електронів у P- та As-легованому кремнії від концентрації легуючої речовини при роз-сіюванні на M- іонах.

Література

1. G. Kaiblanger-Grujin, H. Kosina, S. Selberherr, J. Appl. Phys. **83**, 3096 (1998)
2. G. Masetti, M. Severi, S. Solmi. IEEE Trans. Electron Devices **ED-30**, 764 (1983)

Нелінійні властивості просторової модуляції параметру порядку в тіокарбаміді

Шимановський А. Р.¹, Клепіков В. Ф.¹²

¹Харківський Національний Університет імені В. Н. Каразіна, м. Харків, Україна,

E-mail: andrey.shimanovskii@gmail.com

²Інститут електрофізики і радіаційних технологій НАН України, м. Харків, Україна

Тіокарбімід — є відомою органічною сполукою, яка серед низки різноманітних застосувань використовується також при виробництві напівпровідників, наприклад ZnS, який є типовим напівпровідником n-типу[1]. Тому комплексне вивчення фізико-хімічних властивостей тіокарбіміду є важливим для оптимізації методів синтезу низькорозмірних напівпровідникових матеріалів.

Особливістю тіокарбаміду є те, що при його описі з застосуванням скалярного параметра порядку, спостерігаються стани, у яких вклад вищих гармонік містить нелінійну компоненту [2,3] і її масштабом не можна нехтувати.

В роботі [4] здійснено аналіз термодинамічного потенціалу з застосуванням розкладу еліптичного синусу, тоді як в роботі [5] здійснюється аналіз з застосуванням суми гармонік косинусів.

Нами було запропоноване використання термодинамічного потенціалу:

$$F = F_0 + \int dx \left[\frac{1}{2} (\varphi'')^2 + \frac{g}{2} (\varphi\varphi')^2 - \frac{\gamma}{2} (\varphi')^2 + \frac{q}{2} \varphi^2 + \frac{p}{4} \varphi^4 \right], \quad (1)$$

де $g > 0$, $\gamma > 0$, $p > 0$ — матеріальні параметри, а $q = q_0(T - T_c)$. Та використовувати розклад параметру порядку замість суми гармонік косинусів – еліптичний косинус:

$$\varphi(x) = a \cdot cn(bx, k) \quad (2)$$

Переваги цього вибору в порівнянні з [5] у тому, що використання (2) дає можливість отримувати такі самі, або точніші рішення, роблячи набагато менше розрахунків для параметрів a, b, k , а також відтворювати нелінійні властивості параметру порядку.

[1] Padmavathy, V., Sankar, S., & Ponnuswamy, V. (2018). Influence of thiourea on the synthesis and characterization of chemically deposited nano structured zinc sulphide thin films. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 29(9), 7739-7749.

[2] Cummins, H. Z. (1990). Experimental studies of structurally incommensurate crystal phases. *Physics Reports*, 185(5-6), 211-409.

[3] Aramburu, I., Madariaga, G., & Pérez-Mato, J. M. (1994). Phenomenological model for type-II incommensurate phases having a soliton regime: Thiourea case. *Physical Review B*, 49(2), 802.

[4] Berezovsky S.V. (2003) Solitone regime in the model with no Lifshits invariant. Problems of atomic science and technology.-13.-c.14-18

[5] Ishibashi, Y., & Shiba, H. (1978). Successive phase transitions in ferroelectric NaNO₂ and SC (NH₂)₂. *Journal of the Physical Society of Japan*, 45(2), 409-413.

Specific features of dark and light current-voltage characteristics of micro/nanocrystalline TiO_2 powders

P.S. Smertenko¹, V.V. Naumov¹, V.V. Shymanovska², V.O. Yukhymchuk¹

¹V.E.Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 03028 Kyiv, Ukraine

²Institute of Physics, NAS of Ukraine, 03028 Kyiv, Ukraine

Titanium dioxide (TiO_2) is a well-known photoactive wide-bandgap n -type metal-oxide semiconductor material that is widely used in modern photonics, photoelectronics and photovoltaics [1]. But despite all the advances in applications, some functional properties of TiO_2 particles are not so clear, in particular regarding the charge transfer in micro- and nanostructured systems. Here we report our study on the current-voltage characteristics (CVC) of micro/nanocrystalline TiO_2 powders with anatase (A) and rutile (R) structure.

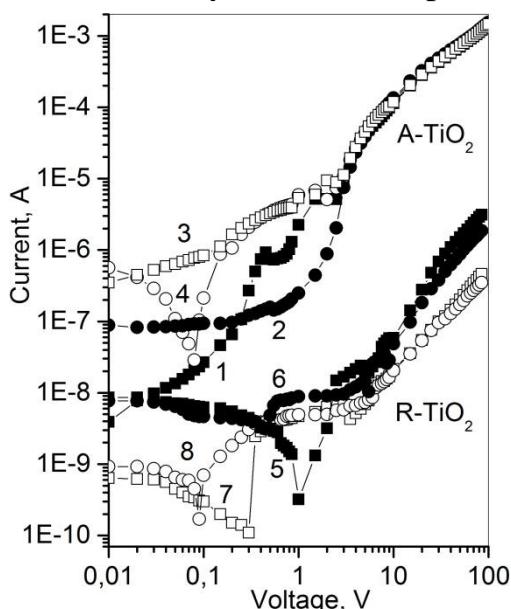


Fig. 1. TiO_2 I-V characteristics in dark (1,2,5,6) and light (3,4,7,8) in forward (1,3,5,7) and reverse (2,4,6,8) loading.

High-purity single-phase A and R TiO_2 was synthesized by thermal hydrolysis followed by calcination at different temperatures [2]. The initial structural, morphological and optical properties were studied by XRD, SEM, FTIR, UV-VIS, and PL. It was found that TiO_2 particles had a well-crystallized structure (crystallite size ~ 10 nm), and the surface density of TiO_2 powders was $\sim 240 \text{ m}^2/\text{g}$ (A) and $95 \text{ m}^2/\text{g}$ (R). The CVC were measured by an automated tester TKS-100 tester in a quasi-stationary mode (voltage range up to 100 V, measurement pulse ~ 90 ms, illumination power $\sim 10 \text{ mW/cm}^2$) [3]. Samples were prepared as a $100 \mu\text{m}$ thick TiO_2 powder layer on ITO glass plates with Ohmic contacts made using Ag paste. Experimental CVC in Fig. 1 show the

following: (i) key nonlinear features appear at low voltages (< 3 V); (ii) at higher voltages (> 3 V) the curves coincide; (iii) under illumination the A curves have usual behavior, while the R curves are unusual, with the dark curves being below the light ones; (iv) A and R curves differ by three orders of magnitude; (v) dark curves have a negative range. Raman spectroscopy after electrical tests revealed in some cases the appearance of a secondary oxide phase on the ITO plates due to photocatalytic effects, but such effects were absent in the TiO_2 samples that had high-temperature calcination.

[1] Marcelis E.J. et al., *Adv. Opt. Mater.* 12 (36) 2401423 (2024).

[2] Kernazhitsky L.A. et al., *Ukr. J. Phys.* 59 (3) 246-253 (2014).

[3] Gorbach T.Ya. et al., *Ukr. J. Phys.* 59 (6) 601-611 (2014).

Нанорозмірний топографічний ефект самоорганізації в надтонких плівках золота

Снопок Б.А., Тетяненко М.П., Корчовий А. А.,

Мамікін С.В., Шварц М.М., Шварц Ю.М.

*Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України,
03028, Україна, м. Київ, пр. Науки 41, e-mail: sнопок@isp.kiev.ua*

Послідовний розвиток плазмоніки передбачає можливість комбінації нанооб'єктів різноманітних форм і розмірів в заданий просторовій архітектурі. Це, зокрема, передбачає можливість оперувати не тільки 3D, а й квазі-2D об'єктами, такими як ультратонкі плівки благородних металів. Проте властивості плівок, товщина яких складає одиниці-десятки нанометрів, все ще залишаються недостатньо вивченими. Зокрема, актуальною проблемою залишається отримання стабільних тонких плівок золота товщиною 10-15 нм з малим опором, тобто таких, які є суцільними 2D середовищами, а не ансамблями окремих поверхневих острівців.

Плівки золота масовою товщиною близько 10 нм отримували методом термовакуумного напилення (залишковий тиск $\sim 2 \cdot 10^{-3}$ Ра, швидкість осадження $\sim 0,2$ нм/с) на кремнієвих підкладках з термічним оксидом (75 нм), що знаходилися при кімнатній температурі (20 °C). МАС зображення вихідних плівок золота показали суцільний характер поверхневого покриття товщиною близько 13,6 нм (11,4 нм по даним еліпсометрії), питомий опір яких складав $\sim 0,1$ Ом·м.

З метою встановлення особливостей електронних процесів на межі розділу Au/SiO_x/Si була використана шарувата структура п'єзоелектрик - напівпровідник, показана на рис. 1 (А). Напівпровідниковий чип з шаром золота фіксувався над поверхнею носія поверхневої акустичної хвилі (ПАХ, уз -LiNbO₃, 37 МГц [1, 2]) із зазором 200 нм, що задається системою опор витравлених на поверхні кристалу. ПАХ збуджуються зустрічно-штировими перетворювачами (ЗШП) і супроводжуються електричним полем, інтенсивність якого експоненційно згасає при віддаленні від поверхні (аналогічно ситуації з evanescent wave у випадку поверхневого плазмонного резонансу або в умовах повного внутрішнього відбивання). Взаємодія цього поля з носіями заряду напівпровідника та плівки золота дозволяє реєструвати поперечний акустоелектричний ефект (ПАЕ) в структурі п'єзоелектрик – плівка золота - напівпровідник. Вимірювання ПАЕ показали, що вихідні плівки золота досить добре екранують електричне поле ПАХ, в результаті чого величина поперечної акусто-електрорушійної сили складає одиниці мВ (рис.1, Б).

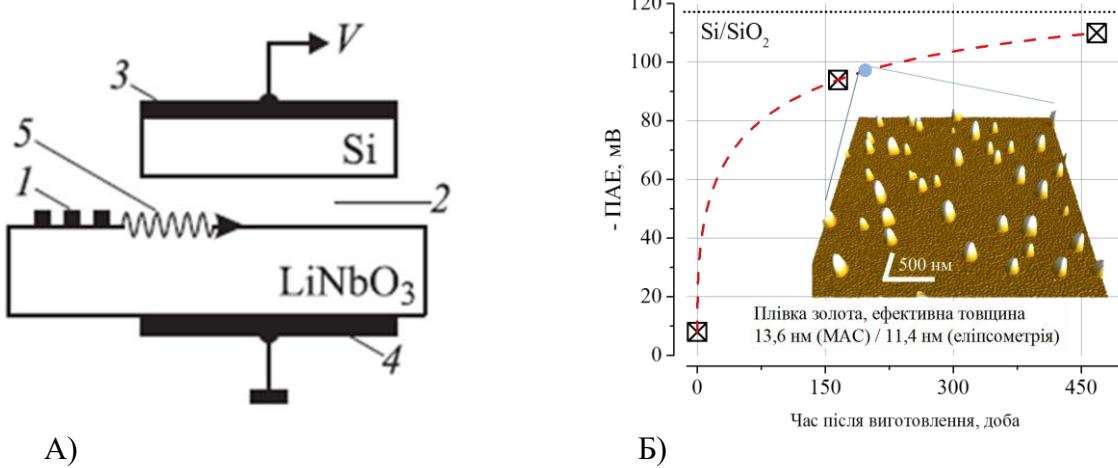


Рис.1. Схема вимірювання сигналу ПАЕ 1 – ЗШП; 2 – повітряний зазор; 3, 4 – металічні електроди; 5 – імпульс ПАХ (А). Залежність відгуку поперечного акустоелектричного ефекту структури Si/SiO₂/плівка Au від часу після виготовлення (Б). На вставці - ACM зображення плівки золота на 204 добу після виготовлення (вихідна плівка без острівців).

Було встановлено, що при зберіганні зразків у звичайних лабораторних умовах величина відгуку ПАЕ зростала і через 15-17 місяців досягла величини, характерної для кремнієвої підкладки без шару золота. Дані MAC показали, що з плином часу на поверхні спочатку плоскої плівки відбувається формування яскраво вираженихnanoструктур золота, висота яких може досягати 100 нм, а діаметр сягає десятків нм. Ефект мимовільної топографічної рекристалізації ультратонких плівок золота спостерігається у вузькому діапазоні масових товщин. Встановлені особливості однозначно свідчать про необхідність врахування даного ефекту при проектуванні і виготовленні nano-структурзованих елементів оптоелектроніки, оскільки вони не тільки є кінетично нестабільними об'єктами зі змінними електричними характеристиками, але й можуть призводити до збудження станів локального поверхневого плазмонного резонансу, змінюючи оптичні характеристики оптоелектронних ліній зв'язку тощо.

Література

1. Gromashevskii V.L., Tatyanenko N.P., Snopok B.A. Effect of the Formation of Silicon Oxide on the Sign, Magnitude and Formation of Surface Charge Upon Water Adsorption on a Silicon Surface. Theor Exp Chem 51, 170–176 (2015). <https://doi.org/10.1007/s11237-015-9412-z>.
2. Gromashevskii V.L., Tatyanenko N.P., Snopok B.A. Acoustoelectronic structures with an air gap for gas analysis. Sensor Letters 8, 554-563 (2010). <https://doi.org/10.1166/sl.2010.1311>.

Механізм перезарядки зарядових станів на поверхні наночастинки BaTiO_3 в матриці рідкого кристалу

Д.О. Стеценко¹, Ю.М. Гуденко¹, О.С. Пилипчук¹, В.В. Вайнберг¹, С.Е. Іванченко²,
І.А. Гвоздовський¹, В.М. Порошин¹, Г.М. Морозовська¹

¹Інститут фізики, Національна Академія Наук України, 46, пр.Науки, 03028 Київ,
Україна

²Інститут матеріалознавства ім. Францевича, Національна Академія Наук України,
3, вул. Омеляна Прицака, 03142 Київ, Україна

Система рідкий кристал з інтегрованими наночастинками BaTiO_3 є цікавим об'єктом для оптичних, оптоелектронних та хімічних застосувань і може бути основою пристройів для накопичення енергії. Вивчення електрофізичних властивостей таких матеріалів є перспективним напрямком наукових досліджень [1].

У роботі досліджені комірки, заповнені чистим нематичним рідким кристалом 5CB та рідкокристалічною суспензією, яка містить 0,5 мас.% та 1 мас.% наночастинок BaTiO_3 ; схематичне зображення досліджуваних зразків представлено на рис.1.

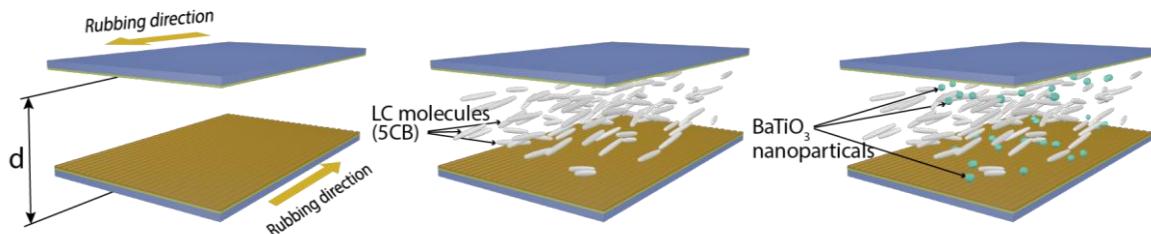


Рис1. Комірки з рідким кристалом 5 СВ і наночастинками BaTiO_3 .

Результати проведених досліджень часових залежностей струму, що протікає через зразок при фіксованих значеннях прикладеної електричної напруги, представлені на рис.2.

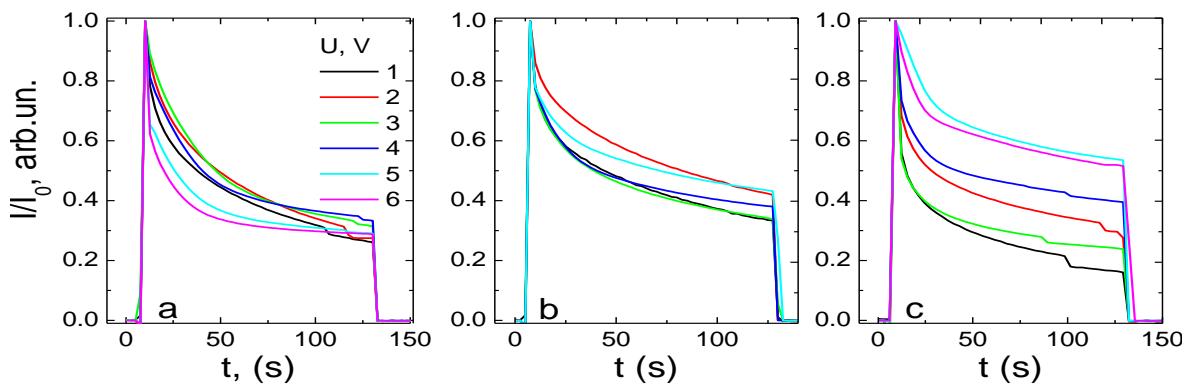


Рис.2 Часові залежності струму, що протікає через зразок при різних значеннях прикладеної напруги для зразків: а) з чистим нематичним рідким кристалом 5СВ, б) та с) з рідкокристалічною суспензією, яка містить 0,5 мас.% та 1 мас.% наночастинок BaTiO_3 , відповідно.

Результати проведених досліджень часових залежностей струму, що протікає через зразок для напруги на зразку в режимі холостого ходу представлени на рис.3.

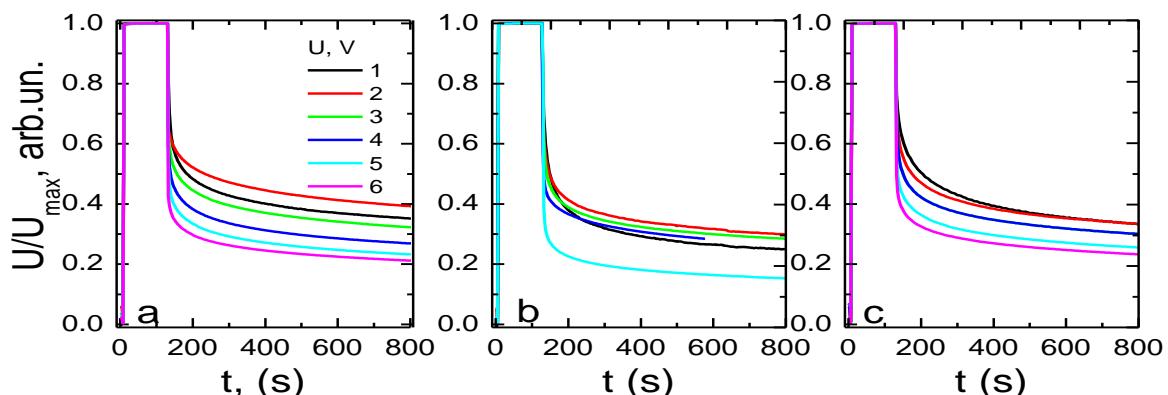


Рис.3 Часові залежності напруги на зразку в режимі холостого ходу при різних значеннях прикладеної напруги для зразків: а) з чистим нематичним рідким кристалом 5СВ, б) та с) з рідкокристалічною суспензією, яка містить 0,5 мас.% та 1 мас.% наночастинок BaTiO_3 , відповідно.

На часових залежностях струму та напруги спостерігається зміна швидкості їхнього спаду. Для зразків з наночастинками BaTiO_3 характерне зменшення часу спаду, що може бути можливою фізичною причиною якого є непрямий вплив екраниуючих зарядів, які покривають сегнетоелектричні наночастинки та поляризуються у зовнішньому електричному полі, а також повільний іонний транспорт у рідкому кристалі.

Для з'ясування фізичної причини часових залежностей струму та напруги було використано модель ефективної діелектричної суміші та чисельне моделювання методом скінчених різниць. Результати розрахунків підтвердили провідну роль екраниуючих зарядів, оскільки поверхня поляризованої сегнетоелектричної наночастинки накопичує іонно-електронний заряд, який (частково або повністю) екранує електричну поляризацію зовні частинки. Коли до рідкого кристалу з наночастинками прикладено електричне поле, воно може вивільнити частину екраниуючого заряду (в тому числі завдяки зміні поляризації наночастинки), що призведе до зменшення часу спаду залежностей струму та напруги на комірці з рідким кристалом та наночастинками.

Подяки. Робота Д.О.С., Ю.М.Г., О.С.П. та Г.М.М. фінансуються НФД України (grant N 2023.03/0132 «Багатократно вироджені метастабільні стани спонтанної поляризації в нанофероїках: теорія, експеримент та перспективи цифрової наноелектроніки»). Робота В.В.В. та В.М.П. фінансуються цільовою програмою НАН України, проект № 5.8/25-П «Енергозберігаючі та екологічно чисті нанорозмірні фероїки для розвитку сенсорики, наноелектроніки та спінtronіки».

[1]. Juliya M. Gudenko, et al. Semiconductor Physics, Optoelectronics and Quantum Electronics, **28**, N 1, 010-018 (2025), <https://doi.org/10.15407/spqeo28.01.010>.

Structural, optical and magneto-optical properties of ZnMeO (Me - Mn, Co, Ni) thin films

I. Stolyarchuk, O. Kuzyk, O. Dan'kiv, A. Stolyarchuk, A. Popovych, O.Bachynskyi

Department of Physics and Information Systems, Ivan Franko Drohobych Pedagogical University, 24 I. Franko str., 82100 Drohobych, Ukraine

Zinc oxide (ZnO) based materials demonstrate attractive properties for different modern technological applications. ZnO has a wide band gap and a high exciton binding energy ($E_g = 3.37$ eV; $E_b = 60$ meV). For this reason ZnO is good candidate for optoelectronic applications such as light-emitting diodes (LEDs) and lasers for the UV and blue regions of the electromagnetic spectrum [1]. In addition, II-VI semiconductor compounds have another functionality as a basic matrix for diluted magnetic semiconductors (DMSs), where a fraction of semiconductor cations are replaced by transition metals (TM) (3d or 4f elements) [2]. Theoretical prediction of ferromagnetism [3] above room temperature in transition metal (TM) doped ZnO based DMSs was additional stimulus for much experimental and theoretical research of these materials. No doubt, magnetic properties of ZnO based DMSs depend significantly on growth technique. Different growth techniques such as chemical vapor deposition, pulsed laser deposition, MO-CVD, spray pyrolysis, magnetron sputtering, sol-gel process, etc have been used for preparing of ZnO-based DMSs thin films. Among these methods, RF reactive sputtering technique is less studied. The present work is devoted to preparing of $Zn_{1-x}Me_xO$ (Me – Mn, Co, Ni) thin films by RF reactive sputtering technique and study of their structural, optical and magneto-optical properties depending on content of TM.

The films of $Zn_{1-x}Me_xO$ (Me – Mn, Co, Ni) were prepared by RF reactive sputtering technique. The composite targets with a diametr of 70 mm were formed by mixing and pressing of ZnO and NiO powders with appropriate rations of components. Content of transition metals in the deposited films has varied in range of 0 – 10 %. The films was deposited on the unheated different substrates (glassss, quartz and sapphire). The structures of the samples have been studied by using X-ray diffraction (XRD) analysis, transmission electron microscopy (TEM) and atomic force microscopy (AFM). The optical absorption and photoluminescence (PL) spectra of the thin films were measured by a UV-visible spectrophotometer at room temperature. The PL spectra were studied under He–Cd laser excitation at 325 nm. Faraday rotation measurements were carried out in spectral range of 350–700 nm at magnetic fields up to 5 T.

The obtained XRD patterns of the pure ZnO and $Zn_{1-x}Me_xO$ (Me – Mn, Co, Ni) oxides showed that all as-grown samples are nanostructured

polycrystalline films. The diffraction patterns of all samples can be indexed to the hexagonal wurtzite structure of ZnO. No additional peaks attributable to secondary phases such as Ni (Co, Mn) metal or his oxides are observed. The absence of the diffraction peaks of transition metal oxides implies that the TM substitute Zn in the ZnO lattice. The surface morphology of the deposited layers show strong dependence on kind of transition metal doping and deposition conditions. According to atomic force analysis the ZnCoO thin films are composed of closely packed nanocrystallites with nanorod shape, whereas the ZnNiO thin films show uniform columnar microstructure.

All the studied films exhibit a sharp absorption edge that is due to the fundamental absorption of ZnO compound. The shift of the absorption edge due to decrease the energy band gap with increasing cobalt content and complex dependence of the energy band gap on content of nickel was observed in optical absorption spectra of the studied films. Upon Ni doping, the absorption edge is blue shifted for $x \leq 0.02$ and red shifted for the films with $x > 0.02$. Such a kind of $E_g(x)$ dependence might be due to the formation of defect energy level of Ni. Additional absorption below the absorption edge can be seen for the $Zn_{1-x}Ni_xO$ films. This absorption structure is associated with d-d electron transitions of Ni^{2+} ions in a tetragonal crystal field. In particular, the observed peak can be attributed to $^3T_1(F) \rightarrow ^3T_1(P)$ transitions of the Ni^{2+} ions.

The increase of the Faraday rotation in region of the absorption edge is clearly observed with increase of TM-content. It is well known that for DMS materials, the large exchange interaction between the band states of electrons (holes) and the localized d electrons of magnetic ions leads to strong enhancement of the Faraday rotation [4]. The performed analysis of magnetic field dependence of the Faraday rotation gives additional evidence for paramagnetic behavior of $Zn_{1-x}Mn_xO$ and $Zn_{1-x}Me_xO$ with $x \leq 0.02$ ($Me - Co, Ni$) films at room temperature. At same times for $Zn_{1-x}Me_xO$ ($Me - Co, Ni$) thin films with $0.02 < x \leq 0.1$ this dependence demonstrates ferromagnetic behavior.

1. PeartonS.J., Norton D.P., Ip K., HeoY.W., Steiner T., / Recent progress in processing and properties of ZnO // Prog. Mater.Sci. 50, 293-340 (2005).
2. Awschalom D.D., Loss D., Samarth N., (Eds.), Semiconductor Spintronics and Quantum Computation, Springer, Berlin, 2002.
3. T.Dietl et. al, Science 287, 1019 (2000)
4. P.I. Nikitin, A.I. Savchuk, Sov. Phys. Usp. 33, 974 (1990)

Monte Carlo simulation of high-field and high-frequency transport characteristics of 2D electron gas in GaN-based quantum wells

G. I. Syngayivska¹, V. V. Koroteyev^{1, 2}, and V. A. Kochelap^{1, 2}

¹ Department of Theoretical Physics, Institute of Semiconductor Physics, 03028 Kyiv, Ukraine

² CENTERA Laboratories, Institute of High Pressure Physics PAS, 01-142 Warsaw, Poland

The nitride-based quantum-well (QW) heterostructures are intensively investigated and considered as a key component of modern terahertz (THz) electronic and opto-electronic devices, including THz-detectors [1] and THz-modulators [2]. Also, the plasmonic crystal structure based on AlGaN/GaN is recently studied as modulator for high-power picosecond pulses [3].

The explanation and interpretation of many experimental results require a deep understanding of behavior of 2D electron gas (2DEG) at high applied electric field and high-frequency signals. In this area, the theoretical studies based on the exact solutions of Boltzmann transport equation (BTE) are quite important. We analyze both the steady-state (*dc*) and high-frequency (*ac*) electron transport characteristics using both Monte Carlo simulation [4] and Baraff approach [5] adopted for the case of 2DEG. The so-called streaming transport regime with formation of strongly-anisotropic electron distribution in momentum space is studied in details.

In transport model, the lateral electron transport (along the x -axis) in a rectangular AlGaN/GaN/AlGaN quantum well (QW) with infinitely high barriers (Fig. 1 (a)) is considered.

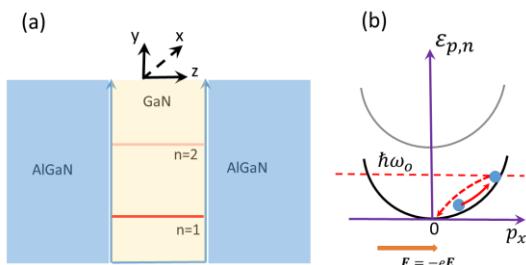


Fig. 1. (a) Sketch of considered QW-heterostructure, (b) electron dispersion law and illustration of streaming electron

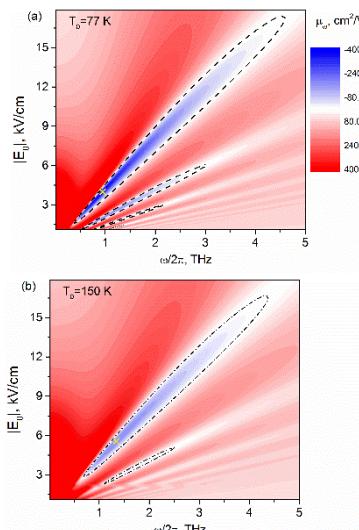
account: (i) electron scattering on acoustic phonons via the deformation potential and (ii) scattering on confined LO-phonons. The linear dispersion of acoustic phonons and dispersionless LO-phonons are assumed.

We found that the streaming transport regime can be realized at low lattice temperatures, $T < 150$ K, and under sufficiently strong applied electric fields, $E_0 = 2 \dots 20$ kV/cm. This regime is characterized by the formation of a highly anisotropic electron distribution function, resulting from quasi-periodic

ballistic motion interrupted by instantaneous LO-phonon emission. In this, the electron drift velocity and average energy become nearly field-independent, stabilizing at approximately $V_0 / 2$ and $\hbar\omega_0 / 3$, respectively.

Fig. 2 shows the electron distribution at $T_0 = 77$ K and $E_0 = 5$ kV/cm as function of dimensionless electron momentum components (ρ_x, ρ_y), where $\rho_i = p_i / p_0$ (the red cross marks the maximum of the distribution). The distribution is strongly elongated along the field direction and restricted by a circle with radius $p_0 = (2m^*\hbar\omega_0)^{1/2}$ ($\rho = 1$).

Under streaming conditions, the electron subsystem exhibits a non-Drude response to an *ac* electric signal $E(t) = E_\omega \cos(\omega t)$, including the emergence of negative dynamic mobility (NDM) windows. This corresponds to the effect of optical phonon transit-time resonance (OPTTR), where the resonance frequency is defined as $\nu_{res} = eE_0 / p_0$, relating to the time between successive LO-phonon emissions. Fig. 3 summarizes the results of Baraff approach (color maps) and Monte Carlo method (black and blue dotted isolines). These isolines correspond to $\text{Re}[\mu_\omega](E_0) = 0$ and $-100 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, respectively. At 77 K (Fig. 3 (a)), OPTTR manifests as gain islands (marked by blue colors) in the frequency range of 0.5...4.5 THz and field strengths 1.5...17 kV/cm. The gain islands corresponding to the high-order OPTTRs are much narrower. At 150 K (Fig. 3 (b)), the effect is significantly weakened, and NDM occurs only for the first-order resonance. And at $T > 200$ K, gain islands are no longer observed.



We believe that further investigation of the streaming transport regime in nitride-based structures opens promising perspectives for the development of electrically-pumped and tunable compact THz generators which is a significant challenge for modern THz technology.

- [1] N. Dyakonova, W. Knap, G. Cywinski, et al, J. Appl. Phys. 120, 164507 (2016).
- [2] P. Sai, et al, Physical Review X, **13**, 041003 (2023).
- [3] P. Sai et al, Extreme Terahertz Nonlinearity of AlGaN/GaN-based Grating-Gate Plasmonic Crystals. preprint arXiv:2503.02562 (2025).
- [4] G. I. Syngayivska, V. V. Koroteyev, V. A. Kochelap, and L. Varani J. Appl. Phys. **125**, 135704 (2019).
- [5] V. V. Koroteyev, V. A. Kochelap, and L. Varani, J. Appl. Phys., **112**, 083721 (2012).

Впровадження нанокристалічного CdTe в пористий кремній і фотолюмінесценція отриманих структур.

Тріщук Л.І.¹, Пащенко Г.А.¹, Тріщук Р.Л.², Томашик В.М.¹, Капуш О.А.¹

¹Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України,

пр. Науки, 41, 03680, м. Київ, Україна, e-mail: trishchukli@ukr.net

²Національний Технічний Університет України ім. І.Сікорського «Київський політехнічний інститут», пр. Перемоги, 33, 03056, м. Київ, Україна.

Композитні системи, які складаються з матриці і впроваджених в неї нанокристалів цікаві тим, що керування фізичними властивостями таких систем може в широких межах здійснюватися шляхом модифікації як самої матриці, так і впровадженого в неї матеріалу. В даній роботі отримали і дослідили нанокомпозитні структури пористого кремнію (ПК) і нанокристалічного (НК) CdTe шляхом впровадження в твердотільну матрицю ПК колоїдних розчинів НК CdTe і подальшою обробкою при певних температурних режимах.

Колоїдний розчин НК CdTe наносили на поверхню ПК послідовно методом пульверизації, крапельним методом і методом осадження частинок з фіксованого об'єму з подальшим висушуванням при температурі нижче 100 °C. Залежність інтенсивності фотолюмінесценції (ФЛ) від густини осаджених на поверхню ПК частинок CdTe подана на рис. 1. Точки А і В відповідають інтенсивності ФЛ вихідних об'єктів – ПК і розчину НК CdTe відповідно.

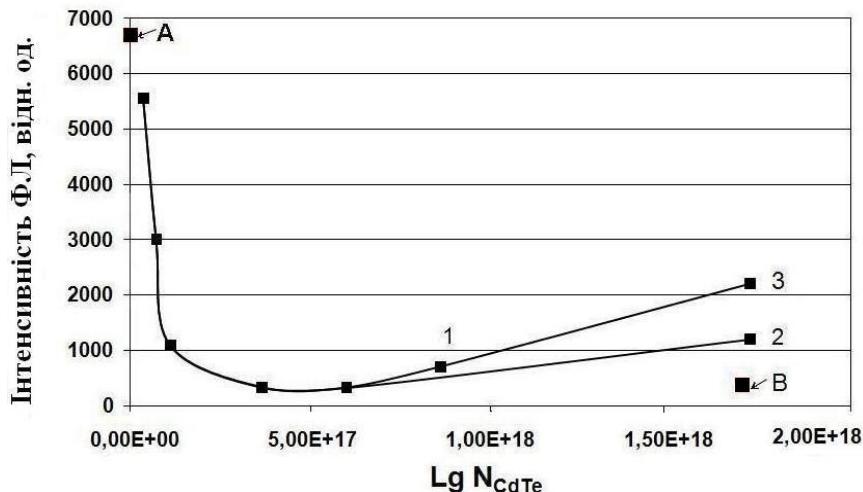


Рис. 1. Залежність інтенсивності ФЛ структури ПК – НК CdTe від кількості осаджених НК CdTe

Зі збільшенням N_{CdTe} до значення $1 \cdot 10^{17}$ НК/см² інтенсивність ФЛ швидко зменшується. Потім відбувається більш повільний спад інтенсивності до значення, близького до інтенсивності ФЛ розчину НК CdTe, і при $N_{CdTe} \geq 6 \cdot 10^{17}$ НК/см² визначальною стає ФЛ НК CdTe. При додаванні в розчин з $N_{CdTe} = 1,7 \cdot 10^{18}$ НК/см² 5% ізопропілового спирту інтенсивність випромінювання стає в п'ять разів більше інтенсивності ФЛ колоїдного розчину НК CdTe (т. 3 і В). При тому ж значенні N_{CdTe} інтенсивність ФЛ зростає також і в разі

введення в осаджуваний розчин НК CdTe етилового спирту (т. 2), що пояснюється покращенням змочуваності розчином поверхні кремнію.

На рис. 2 показані спектри ФЛ системи ПК – НК CdTe на різних етапах нанесення наночастинок CdTe на пористу поверхню Si. При осадженні на

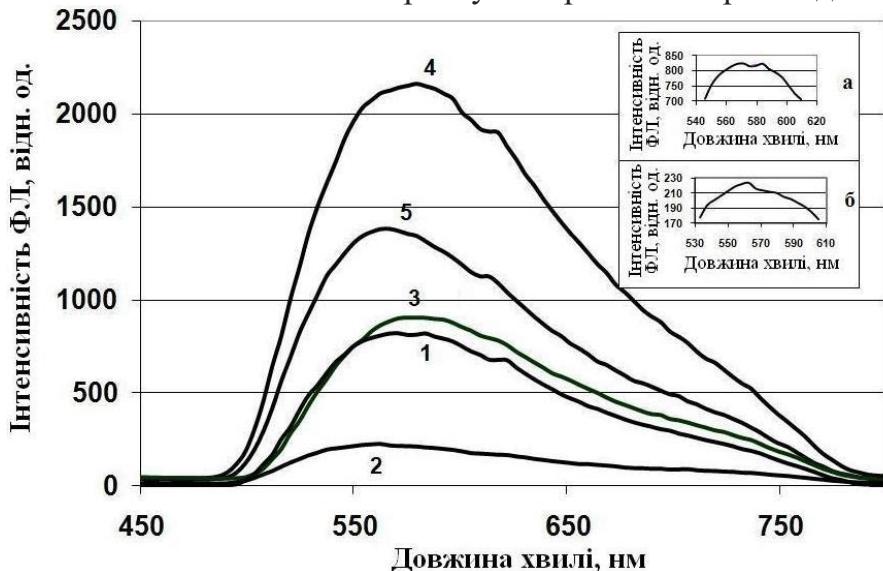


Рис. 2. Спектри ФЛ системи ПК – НК CdTe при N_{CdTe} (НК/см²)
1 – $1 \cdot 10^{17}$; 2 – $3,6 \cdot 10^{17}$, 3 – $8,6 \cdot 10^{17}$, 4 і 5 – $1,7 \cdot 10^{18}$.

Вставки: а – форма піка кривої 1, б – форма піка кривої 2

початкових етапах, коли N_{CdTe} не перевищує $3 \cdot 10^{17}$ НК/см², спектр ФЛ однозначно визначається випромінюванням ПК, тому що випромінювання осаджених НК CdTe ще не можуть помітно вплинути на інтенсивність випромінювання композитної системи, а швидке зменшення інтенсивності ФЛ на цій ділянці відбувається завдяки зменшенню вільної випромінювальної поверхні ПК. Крім того в інтервалі N_{CdTe} ($7 \cdot 10^{16}$ – $3 \cdot 10^{17}$) НК/см² спостерігається незначне розширення смуг ФЛ ПК і розщеплення їх на дві підсмуги з максимумами 571 нм і 580 нм (вставка а). Це пояснюється тим, що ФЛ в пористих матеріалах обумовлена не тільки квантовим обмеженням носіїв заряду в нанорозмірних кристалах, але й станом дуже розвиненої поверхні, яка впливає на їх оптичні властивості.

У вузькому діапазоні N_{CdTe} від $3 \cdot 10^{17}$ НК/см² до $5 \cdot 10^{17}$ НК/см², коли інтенсивність ФЛ ПК і НК CdTe стають порівнянними, спектр системи визначається сумою смуг ПК і НК CdTe (вставка б), а при $N_{\text{CdTe}} 6 \cdot 10^{17}$ НК/см² він по інтенсивності і спектральному складу збігається зі спектром колоїдного розчину НК CdTe. Останнє свідчить про те, що матриця ПК не впливає на структуру і оптичні властивості НК CdTe.

Методом впровадження в пористу поверхню кремнію НК CdTe створена міцна стабільна структура. ФЛ композитної системи ПК – НК CdTe може мати набір спектрів в результаті зміни концентрації НК CdTe і введення в колоїдний розчин ізопропілового або етилового спирту. Очевидно, що варіювання властивостей ПК і колоїдних розчинів НК CdTe шляхом технологічних прийомів дозволить в широкій області управляти фізичними властивостями даної композитної системи.

Вплив концентрації Mn та температури синтезу на структурні та магнітні властивості НК ZnO:Mn

О.В. Коваленко, В.Ю. Воровський, В.В. Славний

Дніпровський національний університет ім. Олеся Гончара,

e-mail: kovalenko.dnu@gmail.com

Оксид цинку, легований марганцем ($ZnO:Mn$), входить до складу розбавлених магнітних напівпровідників (РМН), які останнім часом інтенсивно досліджуються у зв'язку із можливістю їх використання у спінтроніці. На даний час в літературних джерелах відсутня інформація про дослідження структурних та магнітних властивостей нанокристалів (НК) $ZnO:Mn$ у вигляді нанопорошку, отриманих методом ультразвукового піролізу аерозолю (УПА). Синтез НК таким методом відбувається в нерівноважних умовах, в об'ємі однієї краплі розчину аерозолю [1]. Такі умови синтезу РМН не можуть бути відтворені іншими методами, тому проведення досліджень фізичних властивостей таких НК є актуальною задачею.

Метою роботи було встановлення впливу концентрації домішки Mn на структурні та магнітні властивості НК $ZnO:Mn$, отриманих методом УПА. Досліджувались зразки НК ZnO та $ZnO:Mn$ з концентрацією Mn 2, 4 та 8 ат.%, отримані при різних температурах синтезу. Встановлено, що при збільшенні концентрації Mn відбувається зменшення кристалічної якості зразків. Узразках, отриманих при $T = 650^{\circ}C$ при концентрації Mn > 4 ат.%, фіксуються вторинні фази, що свідчить про низький рівень розчинності Mn в ZnO . Показано, що у цих зразках параметри кристалічної гратки a та c та об'єм елементарної комірки V є значно меншими при порівнянні з такими ж параметрами в монокристалічному ZnO . Це є ознакою наявності у кристалічній гратці деформаційних напружень та може бути пов'язане з наявністю великої кількості дефектів - кисневих вакансій V_o . При синтезі зразків при $T = 750^{\circ}C$ вказані параметри значно більші ніж у монокристалічному ZnO , що є наслідком ефективного процесу легування Mn та зменшення кількості дефектів у зразках. Встановлено, що межа розчинності домішки Mn при синтезі при $T = 650^{\circ}C$ не перевищує 4 ат.%. При синтезі при $T = 750^{\circ}C$ межа розчинності збільшується, що дозволяє отримувати однофазні зразки з концентрацією Mn > 8 ат.%. Встановлено, що НК $ZnO:Mn$ з концентрацією 2 ат.% мають розміри 36,2 та 40,7 нм при синтезі за температурами $T = 650^{\circ}C$ та $T = 750^{\circ}C$, відповідно. Розмір НК зменшується під час легування та зростає при збільшенні температури синтезу. З врахуванням малої розчинності домішки Mn при синтезі методом УПА зроблено припущення, що значна кількість іонів Mn під час формування НК $ZnO:Mn$ розміщаються на поверхні НК, утворюючи

дефектну оболонку. Тому дефектна структура НК може мати вигляд структурно впорядкованого кристалічного ядра та дефектної облонки, в якій розміщена домішка Mn.

Було проведено дослідження впливу концентрації Mn та температури синтезу на феромагнітні властивості (ФВ) НК ZnO:Mn. Встановлено, що максимальну намагніченість ($M_s = 0,035 \text{ Гс}\cdot\text{см}^3/\text{г}$) мають зразки з концентрацією Mn 2ат.-% отримані при температурі синтезу $T = 550^\circ\text{C}$. Збільшення концентрації домішки Mn приводить до зменшення ФВ зразків (рис.1). У відповідності до моделі феромагнетизму РМН – моделі зв’язаних магнітних поляронів таке зменшення ФВ може бути наслідком зменшення відстані між іонами Mn, які безпосередньо взаємодіють один із одним, що приводить до появи антиферомагнітних властивостей [2].

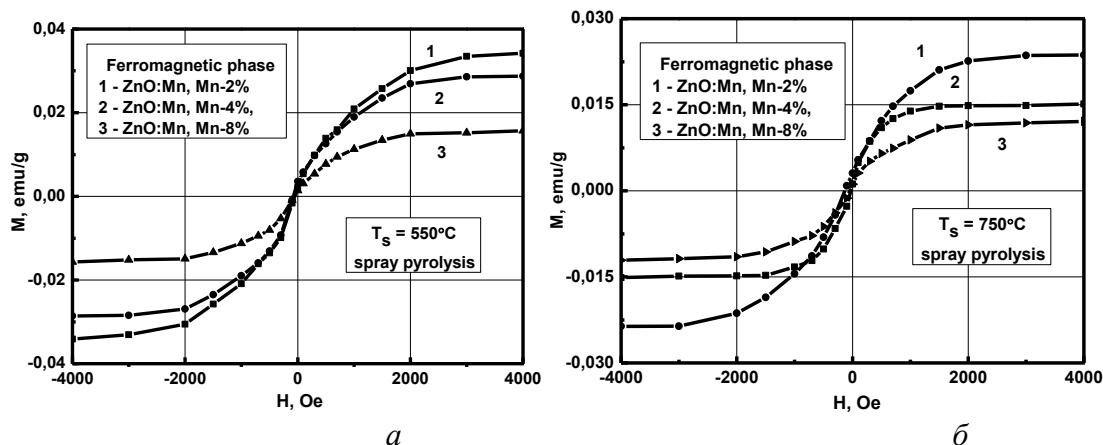


Рис. 1. Криві намагніченості феромагнітної фази зразків ZnO:Mn синтезованих при температурах $T = 550^\circ\text{C}$ (а) та $T = 750^\circ\text{C}$ (б) з концентрацією домішки Mn: 2ат.-% - 1; 4ат.-% - 2; 8ат.-% - 3.

Збільшення температури синтезу зменшує ФВ зразків (рис.1б) в наслідок зменшення кількості дефектів (кисневих вакансій V_o). Показана можливість інтерпритації отриманих результатів у рамках моделі зв’язаних магнітних поляронів, але для цього необхідно враховувати не тільки кількість, але і співідношення кількостей учасників магнітної взаємодії - кисневих вакансій V_o та іонів Mn^{2+} . Показано, що із врахуванням розташування останніх у дефектному приповерхневому шарі НК ZnO:Mn механізм формування ФВ при синтезі методом УПА має поверхневий характер.

1. S.C. Tsai, Ultrasonic spray pyrolysis for nanoparticles synthesis, *Journal of Materials Science*. 2004, Vol. 39, No.11. p. 3647-3657.
2. J. M. D. Coey, M. Venkatesan, C.B. Fitzgerald, Donor impurity band exchange in dilute ferromagnetic oxides. *Nat. Mater.* 2005, Vol.4, p.173–179.

Оптичні і світловипромінюючі властивості nps-Si—SiO_x:Sm наноструктур

Михайлівська К.В., Литвин В.К., Шепелявий П.Є., Індутний І.З., Сопінський М.В.

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
Проспект Науки, 45, 03028 Київ, Україна, E-mail:k_mich@ukr.net

Ця робота присвячена вивченю можливості створення світловипромінюючих наноструктур на основі плівок SiO_x:Sm за спрощеною технологією та аналізу впливу самарію на їхні структурні, оптичні і люмінесцентні властивості. Плівки SiO_x:Sm одержували термічним випаровуванням у вакуумі порошкової суміші (SiO+Sm) з вмістом Sm ~ 1 ваг. % з подальшою термообробкою при 500–700 °C протягом 15 хв. Попередні дослідження TOF-SIMS показали, що розподіл базових елементів у плівках наближений до однорідного, а вміст Sm складав менше 1,0 ат. %. Частина Sm перебувала у вигляді оксиду SmO, що пояснювало відсутність у спектрах поглинання і випромінювання ліній, характерних для електронних переходів Sm²⁺ і Sm³⁺. Водночас навіть незначний вміст Sm впливав на термостимульовані перетворення у плівках. При термічному випаровуванні (SiO+Sm) відбувалася взаємодія між компонентами у випарнику, що спричиняло частковий розпад SiO. Внаслідок цього склад осаджених плівок ставав негомогенним, утворюючи суміш фаз SiO_x ($x < 2$) і SiO₂, що підтверджувалося ГЧ-спектрами. Фазове розділення посилювалося під час термообробки, сприяючи формуванню наночастинок кремнію (nps-Si) і зростанню гетерогенності.

Вимірювання спектральної залежності коефіцієнта поглинання α (Рис. 1) показало наявність смуги з максимумом при ~1,8 eВ на краю поглинання та два інтервали зростання α в області міжзонних переходів. Для $hv = 2,3\text{--}2,7$ eВ метод Тауца дав значення ширини забороненої зони (E_{go}) ~1,5 eВ для невідпаленої плівки, що відповідає дефектній аморфній нанокремнієвій фазі. Відомо, що E_{go} наночастинок Si залежить від дефектності і розмірів: дефекти знижують E_{go} , а у малодефектних аморфних наночастинках (a -Si) вона зростає зі зменшенням розміру. Після відпалу при 600 °C E_{go} збільшилась до 1,77 eВ, що пояснюється зменшенням дефектності та зростанням розмірів a -Si наночастинок. У більш високоенергетичній частині спектр ($hv = 2,8\text{--}3,2$ eВ) E_{go} становила 2,0 і 2,2 eВ (до і після відпалу, відповідно). Збільшення оптичної ширини забороненої зони після відпалу пояснюється підвищеннем індексу стехіометрії SiO_x-матриці (на що вказують і ГЧ спектри), що збільшує потенційний бар'єр на межі nps-Si/матриця та посилює квантове обмеження в Si наночастинках.

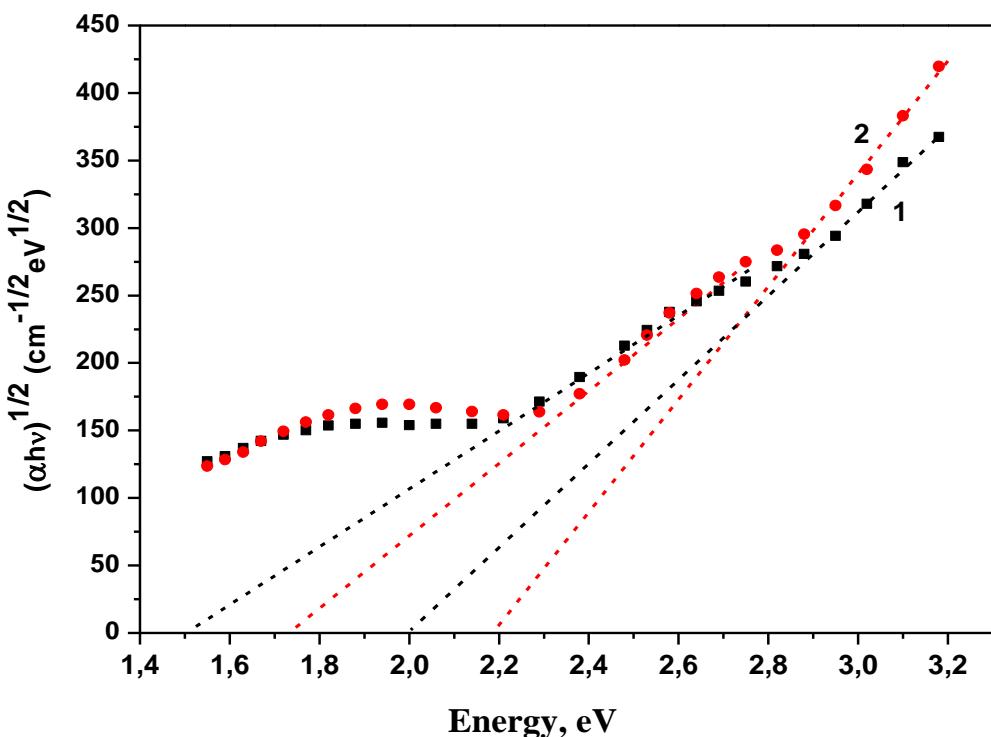


Рис. 1. Спектральна залежність коефіцієнта поглинання в тауцівських координатах плівки $\text{SiO}_x:\text{Sm}$ до і після термообробки при $600\text{ }^{\circ}\text{C}$ (криві 1 і 2, відповідно).

Спектр фотолюмінесценції (ФЛ) невідпаленої плівки охоплював видиму та близнюючу ІЧ-області й мав низьку інтенсивність. Аналіз спектра показав домінуючу широку смугу з максимумом при 800 нм (1,5 еВ). Після відпалу при $T_{\text{an}} \geq 600\text{ }^{\circ}\text{C}$ спектр еволюціонував: смуга ставала асиметричною і добре апроксимувалася трьома гаусовими компонентами з максимумами при 750 нм (1,65 еВ), 820 нм (1,51 еВ) і 910 нм (1,36 еВ). Найінтенсивніша смуга при 750 нм пов'язана з рекомбінацією екситонів усередині наночастинок Si за участю фононів. Смуга при 820 нм обумовлена дефектами поверхні nps-Si на межі з SiO_x -матрицею, а довгохвильова смуга при 910 нм — присутністю кристалічних або квазікристалічних nps-Si, тобто таких, що мають кристалічне ядро. Зі збільшенням температури відпалу до $700\text{ }^{\circ}\text{C}$ максимум цієї смуги зсувався з 910 до 950 нм, а інтенсивність ФЛ зменшувалася, що пояснюється проявом квантово-розмірного ефекту через зростання розміру nps-Si.

Synthesis of ZnTiON oxynitride nanostructured thin films and their optical properties

I. Stolyarchuk, O. Kuzyk, A. Popovych, A. Stolyarchuk, V. Popovych, O. Bachynskyi

Department of Physics and Information Systems, Ivan Franko Drohobych Pedagogical University, 24 I. Franko str., 82100 Drohobych, Ukraine

Oxynitrides are an attractive class of functional materials since the incorporation of nitrogen atoms into the oxide lattice can lead to unique properties. The most of studied oxynitride materials are monometallic systems (for instance, ZnO_xN_y , TiO_xN_y , AlO_xN_y , SiO_xN_y). However, recently the reports have appeared on multinary oxynitrides, which include two and more different metals [1-4]. In this work, we report on synthesis of oxynitride nanostructured thin films included Zn and Ti metals. The nanosized layers of ZnTiON were grown by colloidal sol-gel technique according to the reported in literature [1]. Post-annealing under ammonia gas at 650 °C was applied to provide the nitridation process. The structures of the samples have been studied by using X-ray diffraction (XRD) analysis and atomic force microscopy (AFM). Main finding from the optical absorption spectra is the observed red shift of the absorption edge which is evidence for the replacement of oxygen by nitrogen in the ZnTiON thin films. Effect of adding of Mn dopant into this material on its magneto-optical properties is also discussed.

1. F. Grasset, L. Spanhel, S. Ababou-Girard, Superlattices and Microstructures, 38 (2005) 300;
2. R. Aguiar, D. Loginovich, A. Weidenkaff, H. Karl, C.W.Schneider, A. Reller. S.G. Abbinghaus, Mater. Res. Bull., 43 (2008) 1376;
3. A. Miyaake, Y. Masubuchi, T. Takeda, S. Kikkawa, Mater. Res. Bull., 45 (2010) 505
4. K. Keller, E. Brendler, T. Schlothauer, Journal of Alloys and Compounds, 1018 (2025) 179123

Особливості нанокристалічного германію в перехідному шарі між аморфною та полікристалічною фазами

Б.А. Снопок^{1,2}, М.П. Тетяненко¹, М.М. Шварц¹, Ю.М. Шварц¹

¹Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лаїкарьова НАН України,
03028, Україна, м. Київ, пр. Науки 41, e-mail: snopok@isp.kiev.ua

²Brandenburg Technical University Cottbus-Senftenberg, Universitätsplatz 1, 01968
Senftenberg, Germany

Тонкі плівки напівпровідників є основною складовою частиною оптоелектронних пристройів, починаючи від сонячних панелей та сенсорів до елементів інтегральної мікроелектроніки. Враховуючи сучасний рівень інтеграції, характерні розміри таких елементів складають одиниці-десятки нанометрів. Однак, як способи одержання, так і властивості таких структур, все ще недостатньо вивчені.

Плівки Ge товщиною від 5 до 50 нм отримували методом термічного осадження германію в вакуумі на скляні (ТФ-1) та кремнієві підкладки. Технологічні режими осадження плівок: робочий вакуум – $\sim(2\text{-}5)\cdot10^{-6}$ Тор; швидкість осадження – 2-5 нм/с; температура підкладки – 400°C. Кремнієву пластину з шаром Ge фіксували над поверхнею носія поверхневої акустичної хвилі (yz-LiNbO₃, 37 МГц [1]) із зазором 200 нм, який задається системою опор, витравлених на поверхні LiNbO₃, і вимірювали величину поперечного акустоелектронного ефекту (ПАЕ).

Спектри екстинції отриманих структур наведено на Рис. 1.

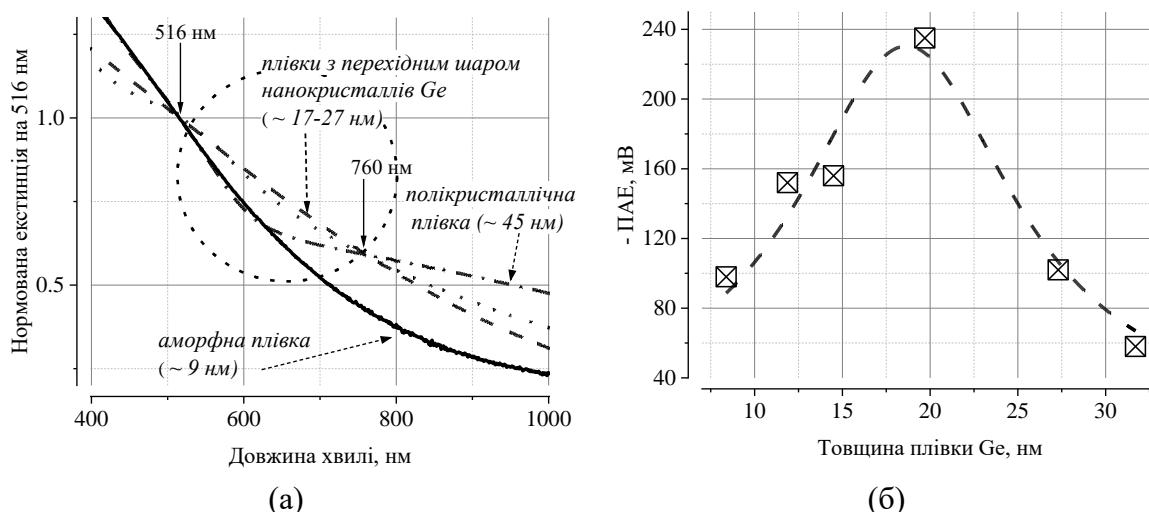


Рис. 1. (а): Нормовані на величину в максимумі поглинання в монокристалічному Ge (516 нм) спектри екстинції плівок Ge на скляній підкладці. (б): Залежність величини ПАЕ від товщини плівки Ge на підкладці КДБ-20 з шаром SiO₂ (88 нм).

Нормування спектрів на величину в максимумі поглинання Ge у видимій області спектра [2] дозволяє виявити, що плівки товщиною ~17-27 нм мають підвищене поглинання/розсіювання по відношенню як до

аморфної, так і полікристалічної фаз. Ця область відповідає проміжному шару, в якому починають формуватися нанокристиали Ge з середнім розміром в декілька нанометрів. Аналіз залежності ПАЕ від товщини плівки Ge також свідчить про зростання вкладу заряджених станів в нанокристалах германію саме в області перехідного шару. Зменшення величини ПАЕ при великих товщинах плівок германію пов'язане із загасанням проникаючого поля поверхневої хвилі в матеріалі. Аномальні особливості електрорушійної сили (EPC) аналогічних структур в умовах освітлення були відзначені нами і раніше: зростання акусто-EPC було обумовлено зіткненням носіїв з границями кристалітів (electron confinement effect) і зміною стану поверхневих пасток [3].

Особливості, що спостерігаються, вірогідно пов'язані з проявом ефектів поверхневих зарядів і струмів в наноструктурах, які зазвичай не розглядаються в рамках класичної оптики. Згідно з сучасним уявленням в області 500-800 нм у Ge відбуваються непрямі переходи з генерацією фонону [4]. Ці процеси можуть ініціювати формування квазічастинок, зокрема, з поверхневим зарядом на межі розділу. Таке припущення добре узгоджується з теоретичними моделями, згідно з якими показник заломлення та коефіцієнт поглинання залежать від товщини шару, а для випадку Ge екстремальні значення припадають саме на діапазон в 17-27 нм [5, 6]. Характерною особливістю даних підходів є врахування струмів і поверхневих зарядів при розрахунках оптичних властивостей наносистем на основі напівпровідникових матеріалів. Керування поведінкою таких станів відкриває нові перспективи оптоелектроніки.

- [1] V.L.Gromashevskii, N.P.Tatyanenko, B.A.Snopok. Acoustoelectronic structures with an air gap for gas analysis.//*Sensor Letters*.-8.- 2010.- P. 554-563.
- [2] <https://refractiveindex.info/?shelf=main&book=Ge&page=Aspnes>.
- [3] J. Menéndez, D.J. Lockwood, J.C. Zwinkels, M. Noël. Phonon-assisted optical absorption in germanium.//*Phys. Rev.-B* 98.- 2018.-P. 165207.
- [4] Б.А. Снопок, М.П. Тетяненко, П.Є. Шепелявий, А.А. Корчовий, С.В. Мамікін, Ю.М. Шварц. Акустостимулюваний фотогальванічний ефект в SiO₂/Si - структурах з нанорозмірною плівкою Ge на їх поверхні. // УНКФН-9, Тези доповідей. - Ужгород, Україна, 22–26 травня 2023 р.- С. 360-361.
- [5] Т.А. Кудыкина, М.П. Лисица. Размерные зависимости оптических параметров тонких пленок Ge, Si, Se и Te.//*Оптоэлектроника и полупроводниковая техника*. - 32. – 1997. - С.106.
- [6] T. A. Kudykina, A. I. Pervak, Optical Properties of Nanometer-Scale Structures.//arXiv:1610.03775 [cond-mat.mtrl-sci].

Рухливість 2D електронного газу в полярних напівпровідниках

Козловський С. І., Коваленко К. Л. та Шаран М. М.

*Інститут фізики напівпровідників НАН України пр. Науки, 41, м. Київ, 03028,
Україна*

Напівпровідники з двовимірним електронним газом (2DEG) привернули величезну увагу дослідників завдяки своїм надзвичайним властивостям і можливому застосуванню в електронних і оптоелектронних пристроях. Висока рухливість носіїв заряду у напівпровідниковому приладі має вирішальне значення для забезпечення високої швидкості перемикання та низького розсіювання потужності у відповідному пристрої. Постійне вдосконалення молекулярно-променевої епітаксії усуває заряджені домішки як механізм розсіювання. Таким чином внутрішня межа найвищої досяжної рухливості електронів в структурах з 2DEG визначається розсіюванням на віддалених іонах і акустичних та оптических фононах. Розсіювання на фононах обмежує рухливість на фундаментальному рівні. Як було зазначено в огляді [1], теорія розсіювання фононів знаходиться на незадовільному етапі. Розрахована рухливість, обмежена розсіюванням акустичних фононів, не тільки значно більша, ніж експериментальна, але й не виявляє залежності рухливості від густини носіїв. Це стимулювало дослідження фононно-обмеженої рухливості. Існує два основні аналітичні підходи до розрахунку рухливості, обмеженої розсіюванням акустичних фононів у 2DEG. Історично перший, по суті, розмірний аналіз обмеженої рухливості акустичних фононів 2DEG базувався на теорії Бардіна-Шоклі для об'ємних напівпровідників. Ця модель, яка називається напівемпіричною або моделлю Takagi, стала популярною в останнє десятиліття. Основною особливістю напівемпіричної моделі є те, що вона передбачає зворотну залежність рухливості від температури. Другою моделлю був квантово-кінетичний підхід, який давав обмежену рухливість акустичних фононів, що зменшувалася з температурою як $\mu_{ph} \propto T^{-2}$. Відповідно до експерименту рухливість електронів зменшується як $\mu_{ph} \propto T^{-1.75}$. Таким чином, для розуміння експериментальних даних необхідно вдосконалити існуючі підходи до розрахунку рухливості 2DEG на фононах. На основі квантового кінетичного підходу [2] у цій роботі отримано аналітичні вирази для низько польової рухливості у 2D напівпровідників квантових структурах з урахуванням екранування. Як механізми розсіювання розглядаються акустичні, полярні оптичні фонони та іонізовані домішки. Встановлено, що широко відому напівемпіричну формулу для рухливості носіїв заряду в умовах розсіювання електронів та акустичних

фононах можна отримати в рамках квантово-кінетичного підходу, нехтуючи дисперсією акустичних фононів. На рис.1 показані експериментальні (кружечки та теоретичні значення рухливості електронів від температури у гетеро структурі $\text{GaAs}-\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$. Видно, що розрахунки рухливості електронів на основі напівемпіричної формулі (пунктирна крива на рис.1) гірше погоджуються з експериментальними даними.

Порівняння теоретичних та експериментальних даних показує, що розсіювання на акустичних та полярних оптичних фононах та іонізованих домішках є домінуючими механізмами розсіювання в гетеро-структурах AlGaN , $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ та $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$. В інтервалі температур є три області, в яких рухливість визначається розсіюванням електронів на іонізованих домішках ($T < 40 \text{ K}$), акустичних ($40 < T < 200 \text{ K}$) і полярних оптических фононах ($T > 200 \text{ K}$) відповідно. Порівняння розрахованих температурних залежностей рухливості з експериментальними даними дозволяє визначити тип фононів, константи їх взаємодії з електронами та дає значення енергії полярних оптических фононів, яка обмежує рухливість електронів при температурі $T > 200 \text{ K}$.

Запропоновано нові значення полярних оптических фононів для опису температурних залежностей рухливості електронів.

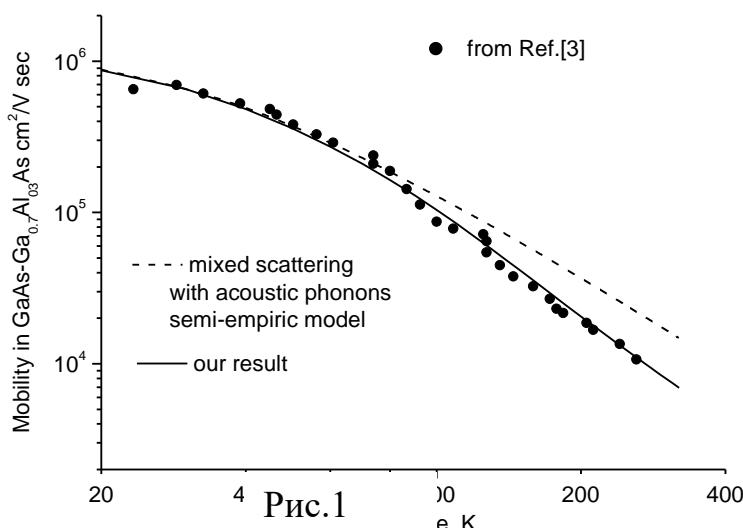


Рис.1

Література

1. T.Ando, A. B.Fowler, and F.Stern, Rev. of Mod. Phys. **54**, 437 (1982)
2. I. I. Бойко. Кінетика електронного газу, що взаємодіє з флюктуаційним потенціалом. (Київ, Наукова думка, 1993).
3. E.E. Mendez, P.J. Price and M.Heiblum, Appl. Phys. Lett. **45**, 294 (1984)

Вплив електричного поля на внутрішньозонне оптичне поглинання в еліптичних квантових кільцях та нанотрубках GaAs

Головацький В.А., Ярема В.В.

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федъковича,
вул. Коцюбинського 2, 58012 Чернівці, Україна, e-mail: v.holovatsky@chnu.edu.ua*

Сучасна технологія створення квантових наноструктур відкриває нові можливості для розробки високочутливих оптоелектронних приладів з заданими спектральними та поляризаційними характеристиками. Особливий інтерес викликають еліптичні наноструктури, зокрема квантові кільця та нанотрубки, які завдяки своїй асиметричній формі демонструють виражені анізотропні властивості.

Попередні дослідження показали, що в еліптичних нанокільцях, ширина яких різна в напрямках різних півосей, існує квазівиродження основного і першого збудженого електронних станів [1], яке негативно впливає на оптичні властивості наносистем, оскільки енергія квантового переходу між цими станами прямує до нуля. Тому в даній роботі досліджуються еліптичні квантові кільця та нанотрубки, що мають однакову ширину/товщину поперечного перерізу. У таких наносистемах подібне квазівиродження з'являється лише при більш ніж двократному співвідношенні півосей еліпса.

Розглядається напівпровідникова еліптична нанотрубка GaAs, поміщена в середовище, яке створює безмежний потенціальний бар'єр за її межами. Нехай a_0 , b_0 та a_1 , b_1 – півосі внутрішнього та зовнішнього еліпсів, які зв'язані співвідношенням $a_1 - a_0 = b_1 - b_0 = d$. Еліптичність наноструктури будемо характеризувати параметром $\chi = a_1/b_1$.

Енергія поперечного руху та хвильові функції електрона у випадку, якщо електричне поле напрямлене вздовж осі O_x, знаходяться з розв'язку рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi_f(x, y) + |e|F \cdot x \cdot \Psi_f + U(x, y)\Psi_f(x, y) = E_f\Psi_f(x, y). \quad (1)$$

Рівняння (1) не має точного розв'язку, тому енергії E_f та хвильові функції електрона $\Psi_f(x, y)$ розраховуються методом скінченних елементів. У нанотрубці в напрямку осі O_Z електрон здійснює вільний рух. Тоді як у випадку еліптичного кільця рух електрона обмежений вдовж осі Oz площинами $z = 0$ та $z = h$. Енергія аксіального руху електрона в нанокільці не поз'язана з енергією поперечного руху і її не враховано у квантових переходах.

На основі функцій $\Psi_f(x, y)$ розраховано сили осциляторів міжпідзонних квантових переходів збуджених поляризованим світлом.

$$F_{ff'}^{x(y)} = \frac{2m}{\hbar^2} (E_f - E_{f'}) |M_{ff'}^{x(y)}|^2, \quad (2)$$

де M_{ff}^x , та M_{ff}^y — дипольні моменти квантових переходів при x - та y -поляризації електромагнітної хвилі. Розрахунки виконувались для еліптичних нанотрубок GaAs з постійною площею поперечного перерізу, яка дорівнює площі круга радіусом $r = 10$ нм, $d = 5$ нм.

На графіках наведено залежності енергій та сил осциляторів квантових переходів від еліптичності χ та однорідного електричного поля

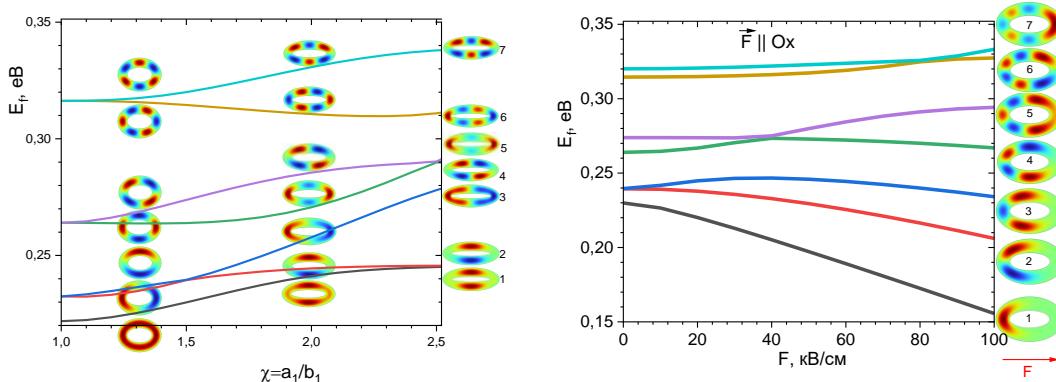


Рис. 1. Залежність енергій E_f від $\chi = a_1/b_1$ та F .

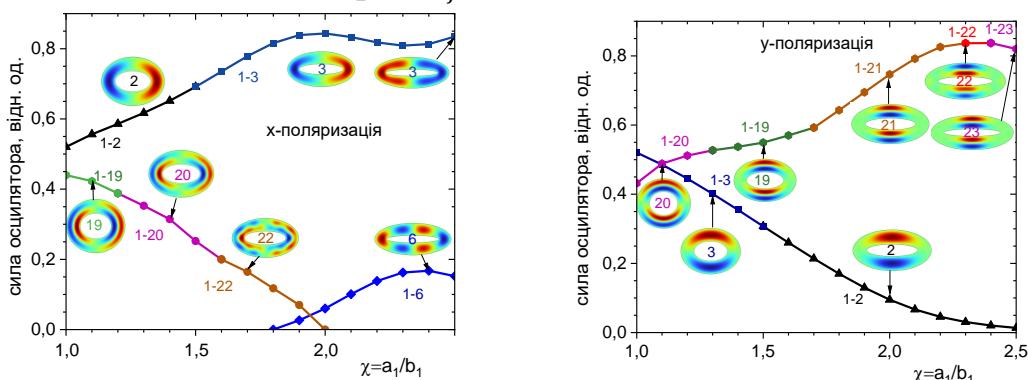


Рис. 2. Залежність сили осцилятора квантових переходів $F_{ff}^{x(y)}$ від χ .

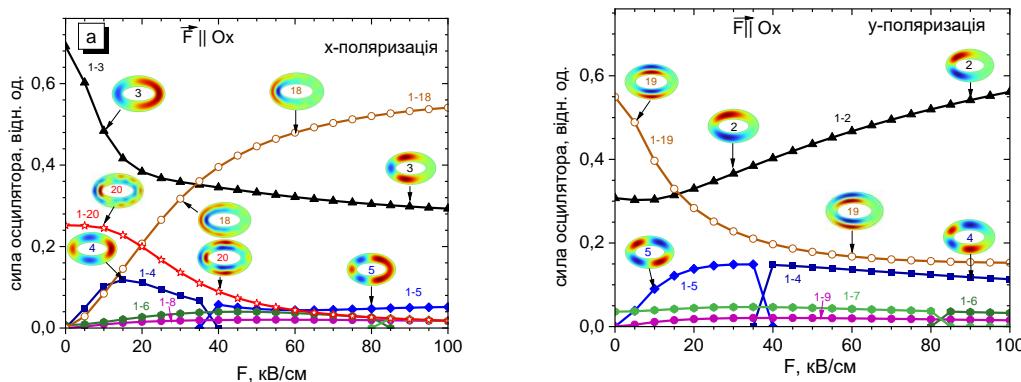


Рис. 3. Залежність сили осцилятора квантових переходів $F_{ff}^{x(y)}$ від F .

З графіків видно, що при x -поляризації переважають переходи в перший збуджений стан, а при y -поляризації — у високоенергетичні. З ростом еліптичності така анізотропія проявляється все більш виразно.

1. Vinasco J. A., Londoño M. A., Restrepo R. L., et al. *Phys Status Solidi Basic Res.* 2018;255(4):1-12. doi:10.1002/pssb.201700470

Гістерезис індукованої магнітним полем деформації вигину балки магнітоактивного еластомера

А.В. Кирилюк, В.М. Калита, Ю.І. Джежеря, С.В. Черепов, Ю.Б. Скирта, С.О.
Решетняк, А.В. Боднарук, С.М. Рябченко

Інститут фізики, НАН України, просп. Науки 46, Київ 03028, Україна

Інститут магнетизму НАН України, бульв. Вернадського 36-б, Київ 03142, Україна

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

Магнітоактивні еластомери (МАЕ), які відносяться до класу «розумних» матеріалів, є композити з наповнювачем з магнітних мікро-чи наночастинок в матриці високоеластичного еластомеру. МАЕ легко піддаються впливу магнітних полів, їх пружні властивості є чутливими до намагнічування. Їм притаманні: аномальний магніто-реологічний ефект (проявляється як суттєва зміна пружного модуля і модуля зсуву при намагнічуванні), велика магнітострикція, ефект пам'яті форми. Інтерес до досліджень МАЕ обумовлений можливістю їх застосувань в якості м'яких роботів, орігамі, актуаторів, метаматеріалів. Для більшості застосувань актуальною є деформація вигину зразка, яку можна спостерігати у невеликих магнітних полях.

Зразок МАЕ був виготовлений із двокомпонентного м'якого силікону Silikon SKR-780 (Словаччина) в якості еластомеру та наночастинок манганіту $\text{La}_{0.8}\text{Ag}_{0.2}\text{Mn}_{1.2}\text{O}_3$ з випадково рівномірним просторово-орієнтаційним розташуванням частинок в суміші. Вивчали індукований магнітним полем вигин балки МАЕ з одним фікованим кінцем, другий

її кінець був вільним. Під дією поперечного магнітного поля, вільний кінець балки зміщувався у площині uz . В експерименті вимірювали зміщення вільного кінця балки, яке на рис. 1 позначене Δd . При вигині мала ділянка балки ΔV повертається в площині uz , кут повороту для обраної ділянки балки позначено $\varphi(z)$. Кут між магнітним полем \mathbf{H} і нормальню до цієї малої ділянки

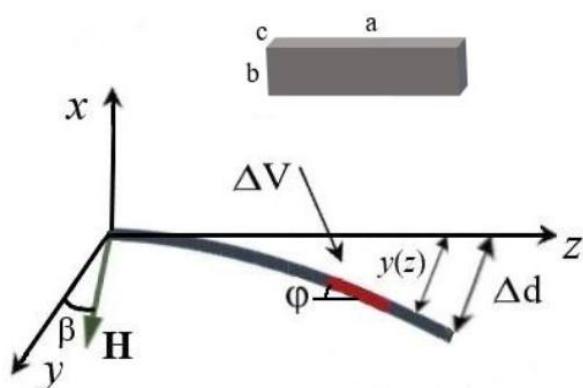


Рис. 1

балки дорівнює різниці $\beta - \varphi(z)$.

Результати: На величину вигину впливає напрямок розгортки магнітного поля, криві $\delta(H)$, де $\delta = \Delta d/L$ (L - довжина балки), для зростаючого чи спадаючого магнітного поля зсунуті одна проти одної (Рис. 2).

Знак $\delta(H)$ не залежить від знаку поля, при зміні напрямку поля, $H \rightarrow -H$, балка вигинається в один і той самий бік, в малому полі пропорційна H^2 .

Циклічність, не зважаючи на залишковий вигин, показує, що при вигині еластомер переважно деформується пружно. Після першого введення виведення додатнього поля, балка набуває залишкової пластичної деформації; набутий залишковий вигин, спостерігається після кожного півцикла введення-виведення магнітного поля.

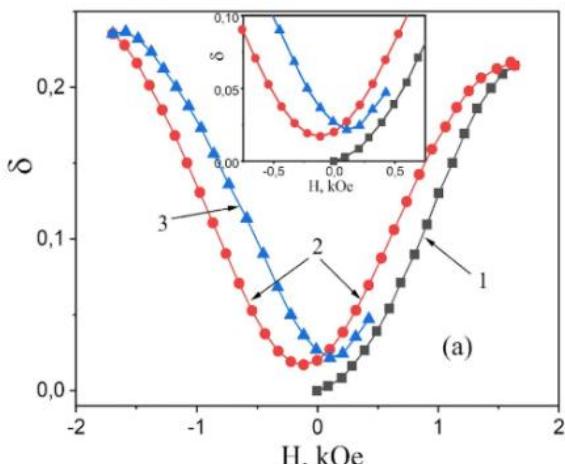


Рис. 2

Гістерезис $\delta(H)$ може виникати:

- внаслідок усереднення локальних пластичних (непружніх) деформацій матриці еластомера в околі магнітних наночастинок;
- завдяки повільної еволюції зміщень магнітних наночастинок і оточень матриці в околі їх закріплення внаслідок магнітореологічного ефекту.

Висновок: Під дією прикладеного магнітного поля зміна форми досліджуваного зразка МАЕ відбувається у основному завдяки пружним деформаціям матриці МАЕ. При виведенні поля форма МАЕ практично повністю відновлюється. Величина внеску у вигин від пластичної деформації прямо пропорційна квадрату напруженості магнітного поля. Це повністю пояснює чому завдяки залишковому вигину не відбувається зміни знаку вигину при інверсії знаку поля. Отримані результати будуть корисними при використанні МАЕ в якості матеріалів для практичних застосувань, при яких використовується індуктований магнітним полем вигин МАЕ.

Qualitative analysis of the differences in physical properties of multilayer structures of quasi-2D crystals

B.Lukyanets, D.Matulka

Lviv Polytechnic National University, Bandery St. 12, 79-013 Lviv, Ukraine

e-mail: dariya.v.matulka@lpnu.ua

In 2004, a 2D crystal, graphene, was obtained. It has a number of extraordinary physical properties. These include a maximum specific surface area, a linear dispersion law with zero band gap, and high carrier mobility. However, the zero band gap severely limits its use in optical and photovoltaic devices. To overcome this limitation, structures with bi-, tri-, and more graphene layers have recently been intensively investigated. Studies have revealed significant changes in properties when moving to structures with different layers. At the same time, such studies have revived interest in similar structures formed from quasi-two-dimensional (q2D) crystals - transition metal dichalcogenides MX_2 (Mo, Ta, Ti, W, Nb, Sn, Zr, Hf, V; X = S, Se, Te), semiconductors A_3B_6 (A = Ga, In; X = S, Se, Te) - which exhibit nonlinear optical properties. The aim of this work is to determine the differences in physical properties in structures with different layering at the qualitative level, taking into account the characteristic features of q2D structures (the existence of packages consisting of a rigidly connected set of monoatomic planes, while the connection between the packages is van der Waals). For this purpose, we use a one-dimensional model with potentials for the monolayer and bilayer structures shown in Fig.

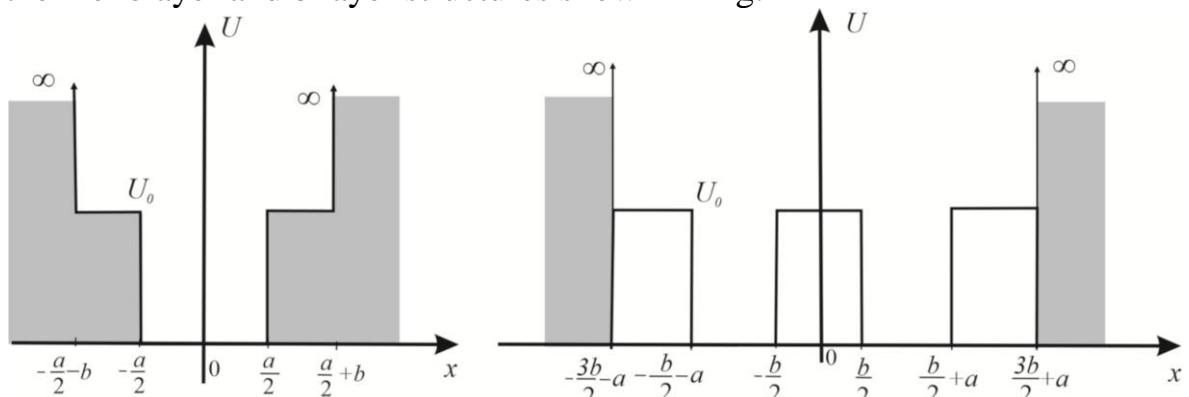


Fig. One-dimensional model with potentials for the monolayer and bilayer structures

They can be considered as mono- and 2-layer fragments of a q2D crystal described by the Kronig-Penney model. In the figure, a barrier of height U_0 and width b describes a package of rigidly bonded monoatomic planes (e.g., Se-Ga-Ga-Se in the case of q2D GaSe). A well with width a (the so-called van der Waals gap) separates the neighboring packages, which interact with each other by weak van der Waals forces. Since q2D crystals are semiconductors, we used a potential mirror-symmetric to the above potential ,

shifted by the band gap E_g , to describe the valence band. The parameters $U_0 = 0.5$ eV, $a = 0.8$ nm, $b = 0.8$ nm have been used. The following conclusions were obtained from the calculations:

1) In both cases, the electronic spectrum is discrete. However, the density of states in the bi-layer structure is much higher than in the mono-layer structure, and the ground state is much closer to the bottom of the band. This means that the optical band gap is significantly higher in the mono-layer structure. This conclusion supports the results of the band spectrum in GaSe obtained by other authors based on the LDA model;

2) Using the obtained wave functions of the states, the possibility of non-zero optical transitions only between states of different symmetry is established;

3) If the spectrum of a mono-layer structure is practically independent of the barrier width b , then in a bi-layer structure its shift is observed with increasing b . In the linear approximation, $dE_1/db \approx -0.1$ eV/nm is for the ground state, $dE_2/db \approx -0.4$ is for the first excited state, and increasing dE_2/db eV/nm first or subsequent excited states.

4) With increasing width of the well a , there is a shift of levels: $dE_1/da \approx -1$ eV/nm for the ground state, $dE_2/da \approx -2$ eV/nm for the first excited state and with increasing values for the subsequent excited states. Such a shift is also observed in the bi-layer structure, but much slower: $dE_1/da \approx -0.04$ eV/nm for the ground state, $dE_2/da \approx -0.20$ eV/nm for the first excited state and with increasing values for the following excited states. It is known that the parameters of q2D crystals can be modified by external factors, in particular, by intercalation or hydrostatic compression. Intercalation leads to an expansion of the well, while compression leads to its contraction, but neither intercalation nor compression practically change the tightly bound packet. Thus, the mono-layer structure is more sensitive to changes under the influence of intercalation or compression than the bi-layer structure.

Thus, the mono-layer structures of different q2D crystals are practically independent of the barrier thickness, but depend on the well thickness. The bilayer structures, on the other hand, are practically independent of the well thickness but depend on the barrier thickness.

Ефективний переріз фотоіонізації воднеподібної домішки в лінзоподібних квантових точках GaAs

Головацький В.А., Головацький І.В., Маханець О.М.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського 2, 58012 Чернівці, Україна, e-mail: v.holovatsky@chnu.edu.ua

Квантові точки (КТ) лінзоподібної форми, які формуються шляхом самозбирання під час молекулярно-променевої або крапельної епітаксії, відіграють важливу роль у розвитку нанофотоніки, оптоелектроніки та квантових технологій. На відміну від колоїдних КТ, які отримуються методами колоїдної хімії і мають сферичну форму, епітаксійні КТ забезпечують кращий контакт із підкладкою, що є критично важливим для їх інтеграції в наноструктуровані електронні схеми.

Контроль над геометрією та просторовим розташуванням таких КТ дозволяє точно налаштовувати їх спектральні характеристики, зокрема ефективний переріз фотоіонізації домішок — один із ключових параметрів для створення фотодетекторів, сенсорів, лазерів та джерел одиночних фотонів. Теоретичне дослідження цих властивостей, зокрема з урахуванням впливу електричного поля, форми квантової точки та положення домішки, дає змогу поглибити розуміння квантових процесів у реалістичних наноструктурах. З цією метою у даній роботі розглядаються дві моделі лінзоподібних КТ: у вигляді сферичного сегмента та напівеліпсоїда (рис.1).

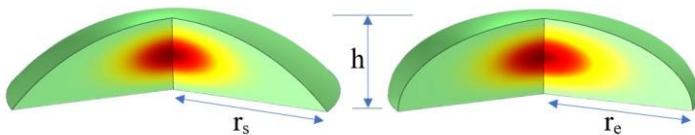


Рис. 1. Схема КТ: а) сферичний сегмент; б) напівеліпсоїд.

Обидві моделі мають однакову висоту та об'єм. Щоб забезпечити рівність об'ємів, радіус основи сферичного сегмента визначається через геометричний параметр сплющеності χ напівеліпсоїда. Це дозволяє коректно порівнювати вплив форми на енергетичні та оптичні властивості.

Енергетичний спектр та хвильові функції в обох наносистемах отримано чисельним методом скінченних елементів в системі COMSOL Multiphysics з використанням таких параметрів: $m^* = 0.067m_e$ (m_e – маса вільного електрона), $h = 10$ нм, $r_e = 20$ нм, $r_s = 22.4$ нм, $\epsilon = 13$.

На основі отриманих розв'язків досліджено залежність енергії зв'язку та ефективного перерізу фотоіонізації домішки від напруженості електричного поля на основі виразу [1]

$$\sigma(\hbar\omega) = \frac{4\pi^2}{n_r} \left(\frac{F_{eff}}{F_0} \right)^2 \beta_{FS} \hbar\omega \sum_f |M_{1f}|^2 \delta(E_b^{1s-f} - \hbar\omega), \quad (1)$$

де $|M_{1f}|^2$ – квадрат модуля матричного елемента дипольного переходу між початковим (зв'язаним) і кінцевим (вільним) станами електрона:

$$M_{1f} = \langle \psi_{1s}^{Z=1} | \vec{r} \cdot \vec{n}_e | \psi_f^{Z=0} \rangle \quad (2)$$

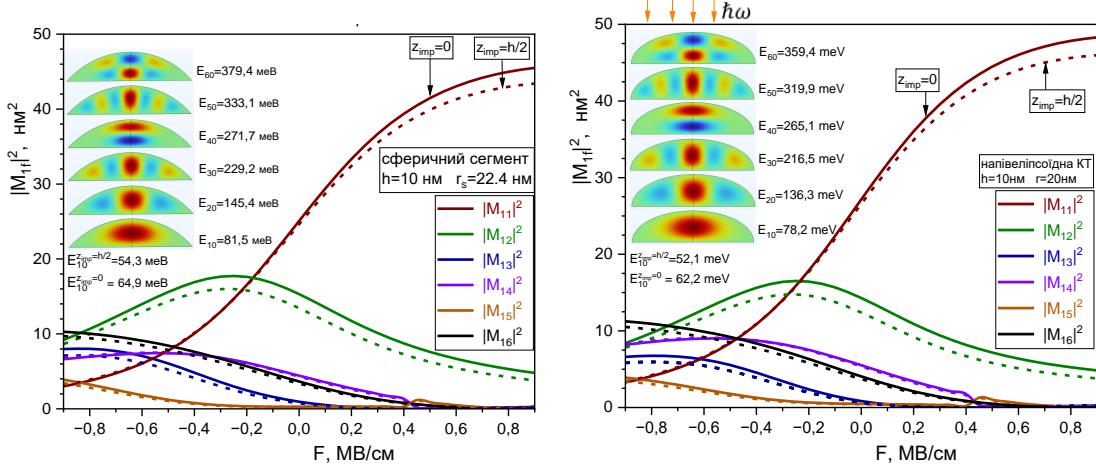


Рис. 2. Залежність дипольного моменту $|M_{1f}|^2$ від напруженості електричного поля для двох моделей лінзоподібної квантової точки.

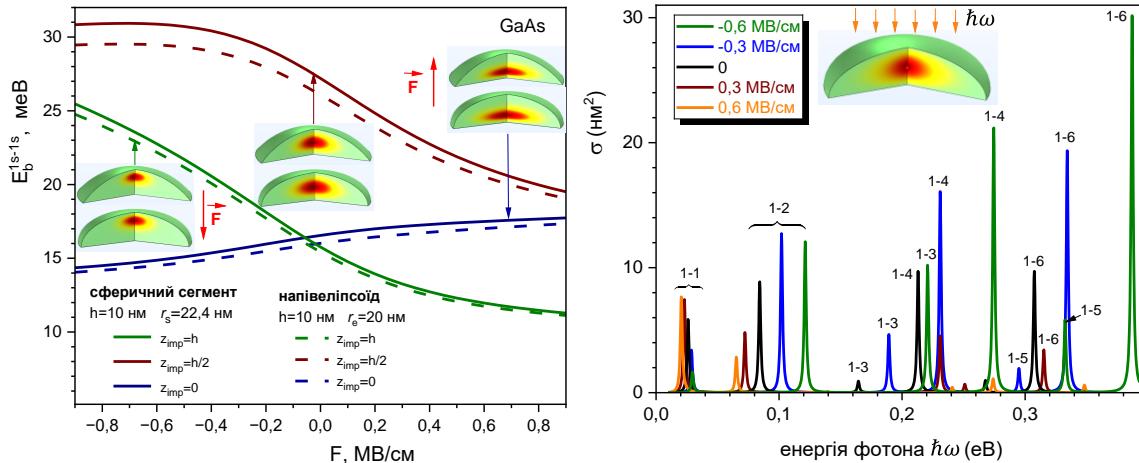


Рис. 3. Залежність енергії зв'язку від напруженості та напрямку електричного поля F .

Рис. 4. Залежність ефективного перерізу фотоіонізації домішки від енергії фотона $\sigma(\hbar\omega)$.

За результатами розрахунків можна зробити наступні висновки. Електричне поле, спрямоване вздовж осі Oz, значно зменшує ефективний переріз фотоіонізації для збуджених станів. Водночас електричне поле, спрямоване до основи квантової точки, різко збільшує переріз фотоіонізації для всіх квантових переходів (за винятком переходу в основний стан без домішки). Максимального значення переріз фотоіонізації досягає для квантового переходу 1–6.

1. Chubrei M. V., Holovatsky V. A., Duque C. A. *Philosophical Magazine*, 2021, 101(24), P.2614–2633.

Shift of LSPR peak of ZnO/Ag nanocomposites due to ZnO magnetic field pre-treatment

R. A. Redko¹, V. V. Shvalagin², G.V. Milenin¹, S.M. Redko¹

¹ V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, 45 Nauky av., 03028 Kyiv, Ukraine

² L. Pysarzhevskii Institute of Physical Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, 31 Nauky av., 03028 Kyiv, Ukraine
corresponding author: redko.rom@gmail.com

Ethanol solutions of ZnO nanoparticles were exposed to a constant and homogeneous magnetic field ($B=60$ mT). The exposure durations were 1 hour, 1 day, and 5 days. These pre-treated solutions were then used for the photocatalytic formation of ZnO/Ag nanoheterostructures under UV irradiation. The production cycle was repeated over a period of 30 days. During this time, the evolution of the optical absorption spectra of the resulting ZnO/Ag nanoparticle solutions was monitored using a Specord 210 spectrophotometer, with measurements taken relative to a cuvette containing pure ethanol. Solution, which not exposed to the magnetic field but stored under the same temperature conditions, was used as reference. Under UV irradiation, photocatalytic reduction of Ag(I) occurs, leading to the formation of ZnO/Ag colloidal heterostructures. These are characterized by an absorption maximum in the range of 400–460 nm, corresponding to localized surface plasmon resonance (LSPR) of the silver nanoparticles

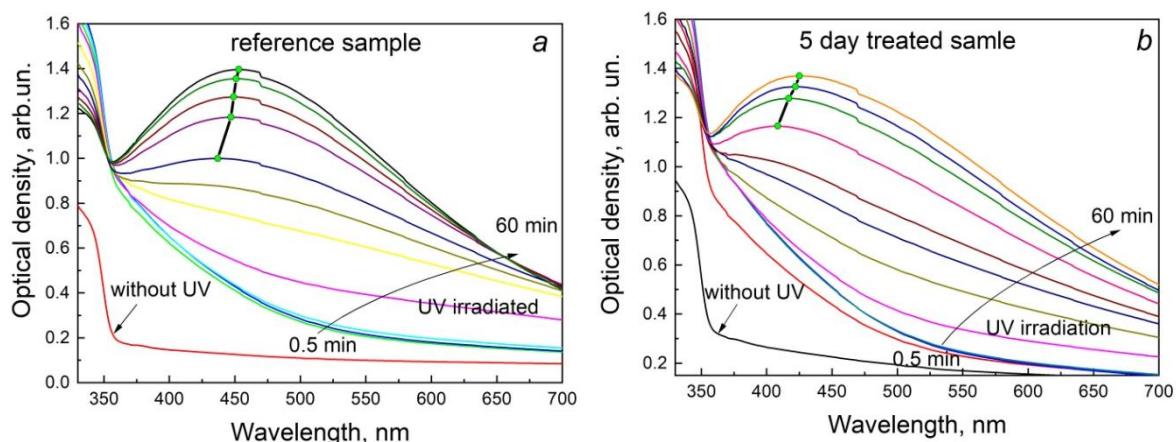


Fig. 1. OD spectra for the reference sample (a) and the pre-treated during 5 days (b) one at different UV radiation doses.

Moreover, increasing the UV dose leads to a redshift of the LSPR peak. This behavior was observed across all studied samples. However, the energy positions of the observed peak at low and high doses of weak magnetic field treatment do not coincide. It was found that over the course of 30 days, the final position of the plasmon absorption maximum of silver, formed on ZnO cores that were exposed to magnetic field treatment, gradually shifts toward

the corresponding position in the reference (untreated) sample. This phenomenon indicates a kind of "memory effect" that persists for up to a month. The physical mechanism behind the observed modification is based on the fact that a ZnO nanoparticle possesses a non-zero magnetic moment even in the absence of an external magnetic field, due to surface states formed by dangling bonds. This is not classical ferromagnetism, of course. Rather, this moment arises from the presence of oxygen vacancies. Photoluminescence spectra confirm their abundance — a broad emission band near 500 nm, typically associated with V_O , was clearly observed. The behavior of such nanoparticles resembles that of ferromagnetic materials in an external magnetic field. In other words, a ZnO nanoparticle tends to orient its magnetic moment along the direction of the external magnetic induction. Prolonged exposure of nanoparticle ensembles to a magnetic field will, logically, lead to the alignment of a greater number of magnetic moments. This explains the observed shift in the plasmon absorption maximum, which was found to be proportional to the duration of magnetic field exposure of ZnO nanoparticle solutions in ethanol. The long-term effect observed over 30 days is most likely due to the thermal disordering of the "magnetized" ZnO nanoparticle system — that is, thermal motion of atoms and molecules causes the nanoparticles to return to their initial, non-magnetized state. LSPR peak shifts under magnetic field influence have been reported before, but not for ZnO nanostructures. The authors of those studies attribute such changes to variations in the refractive index of nanoparticles resulting from magnetization. Based on this, we propose that in our case, the magnetization of ZnO nanoparticles may lead to changes in the refractive index of the near-surface region of ZnO and/or to changes in the shape of ZnO/Ag nanocomposites. These changes are likely responsible for the observed LSPR modifications in the ZnO/Ag system. Modeling with MiePlot 4.16 software supports the fundamental plausibility of this hypothesis. Regardless of the exact physical mechanism involved, magnetic field pre-treatment appears to be an effective tool for tuning the plasmonic properties of silver-based nanoparticles, which holds great promise for the development of next-generation thin-film solar cells.

Acknowledgments

This work was supported by the NATO SPS project G6197 "Plasmonically Enhanced Perovskite Thin-Film Solar Cells" and National Academy of Sciences of Ukraine (Project No.4.11/23-P).

Radiation-induced modification of uncapped InGaAs/GaAs quantum dots

Galyna Rudko^{1,2}, Oksana Strilchuk^{1,2}, Evgen Gule¹, Oksana Lytvyn³, Volodymyr Maslov¹, Baolai Liang⁴ and Yuriy I. Mazur⁵

¹*V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 45 Nauky Ave., Kyiv 03028, Ukraine E-mail: ostrilchuk@gmail.com*

²*National University “Kyiv-Mohyla Academy”, 2 Skovorody Str., Kyiv 04070, Ukraine*

³*Borys Grinchenko Kyiv Metropolitan University, 18/2 Bulvarno-Kudriavskaya Str., Kyiv 04053, Ukraine*

⁴*Department of Electrical and Computer Engineering, California NanoSystem Institute, University of California - Los Angeles, CA 90095, USA*

⁵*Institute of Nano Science and Engineering, University of Arkansas, Fayetteville, AR 72701, USA*

The structures with capped $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum dots (QDs) are rather insensitive to ambient conditions and are used in semiconductor lasers and LEDs, photodetectors, the so-called surface quantum dots (SQD), are highly sensitive to ambient gaseous atmosphere, thus they are the prospective candidates for use as sensors, e.g., for gas detecting, analysis of water and various solutions. Moreover, unlike capped QDs the SQDs can be more easily damaged by rough environmental conditions, and among them, especially by γ -radiation. The aim of the present report is to analyze the radiation resistance of SQD.

We studied the influence of γ -irradiation on the morphology and light-emitting characteristics (including intensity, peak position and half-width of photoluminescence bands) of uncapped $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ SQDs. The arrays of SQDs were grown on GaAs (100) substrates. To study the dose-dependent variation of SQDs arrays we applied irradiation with doses in the range $1 \div 10^3$ kGy range. Morphology alteration of uncapped SQDs arrays under γ -treatment was characterized by atomic force microscopy (AFM) with statistic data processing. Light-emitting properties of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ SQDs were analyzed by photoluminescence method using solid state laser with $\text{hv} = 2.33$ eV for excitation. Spectra were registered at the temperature 7 K.

The observed morphology changes are: with increasing radiation dose the average size of SQDs gradually increases while the surface density of SQDs decreases. The bi-modal size distribution of SQDs was revealed. It is preserved up to the doses of 10^2 kGy, however, the SQD structure is almost completely smeared off by irradiation with the dose of 10^3 kGy. The bi-modal size distribution of SQDs was confirmed by photoluminescence measurements by observation of two peaks corresponding to the SQDs of different average sizes. Dose-related changes of photoluminescence intensity are not monotonous. Irradiation with low doses of γ -quanta leads to the increase of luminescence intensity which was ascribed to the known “low-dose effect” (it implies the annihilation of the initially existing structural

defects with the newly formed defects that were created by radiation). Further intensity increase at higher-dose irradiation is explained by enhanced transfer of carriers from wetting layer to QDs via radiation-induced defect levels, however luminescence bleaches at the doses about 10^3 kGy. The spectral position of both SQD-related luminescence band remains unaltered or weakly blue-shifts under irradiation which is explained by counter-play of two effects: growth of the average sizes of QDs and out-diffusion of indium from QDs.

The observed changes of InGaAs SQDs morphology and optical properties imply that gamma-irradiation with low and moderate doses can be used as a tool of surface engineering in the case of InGaAs SQDs.

Effect of ZnO Refractive Index variation on the LSPR peak of ZnO/Ag Nanocomposites

S. M. Redko¹, G. V. Milenin¹, V. V. Shvalagin², R. A. Redko¹

¹ *V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, 45 Nauky av., 03028 Kyiv, Ukraine*

² *L. Pysarzhevskii Institute of Physical Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, 31 Nauky av., 03028 Kyiv, Ukraine*

*corresponding author: redko.fotya@gmail.com

The blue shift of the LSPR peak from 450 to 410 nm due to magnetic field pre-treatment (60 mT) of an ethanol solution containing ZnO nanoparticles, previously detected, was quite unexpected. This is because undoped ZnO is a paramagnetic material, and the application of an external magnetic field should not normally cause any change in the LSPR peak position of ZnO/Ag nanocomposites. However, the observed effect may occur when ZnO nanoparticles become magnetized under the influence of an external magnetic field [2]. This is a relatively new phenomenon in which nanostructures of inorganic materials exhibit ferromagnetic-like properties [3], mainly due to the presence of structural defects such as vacancies and interstitial atoms. Therefore, the shift observed in [1] may result from changes in ZnO nanoparticles acting as carriers of ferromagnetic properties. It is natural that such magnetization may occur, and this magnetization can lead to a change in the refractive index. This, in turn, may result in the LSPR peak shift, as was also observed in [4].

To verify this assumption, modeling using MiePlot 4.16 software was performed. The Palik database was used for the refractive index of the silver (shell). The core/shell radii of the ZnO/Ag structure for modeling were assumed to be 2.5/6.0 nm. Figure 1 (a–f) demonstrates the shift in the LSPR peak position due to variations in the refractive index of the ZnO core. As can be seen from the figure, the principal feasibility of the proposed assumption was confirmed. However, further investigation is required for complete agreement with the experimental results. According to [2, 3], the surface of ZnO nanoparticles exhibits ferromagnetic-like properties, while the core remains paramagnetic. Therefore, a three-layer model (paramagnetic core / ferromagnetic surface/silver shell) is required for more accurate modeling. The results obtained demonstrate the potential for manipulating the plasmonic properties of nanoparticles, which is promising for the development of next-generation thin-film solar cells.

Acknowledgments

This work was supported by the NATO SPS project G6197 “Plasmonically Enhanced Perovskite Thin-Film Solar Cells” and National Academy of Sciences of Ukraine (Project No.4.11/23-P).

References

1. Redko, R., V. Shvalagin, G. Milenin, S. Redko and A. Sarikov, Materials Research Express Vol. 11, No. 10, 105012, 2024.
2. Ren, H. and G. Xiang, Nanomaterials Vol. 11, No.12, 3199, 2021.
3. Sundaresan A., and C.N.R. Rao, Nano Today Vol. 4, No. 1, 96-106, 2009.
4. Anggraeni K., M. Riswan, P.D. Jayanti, D.L. Puspitarum, H. Ardiyanti, P.E. Swastika, N.I. Istiqomah, M. Arifin and E. Suharyadi, Journal of Magnetism and Magnetic Materials Vol. 614, 172727, 2025.

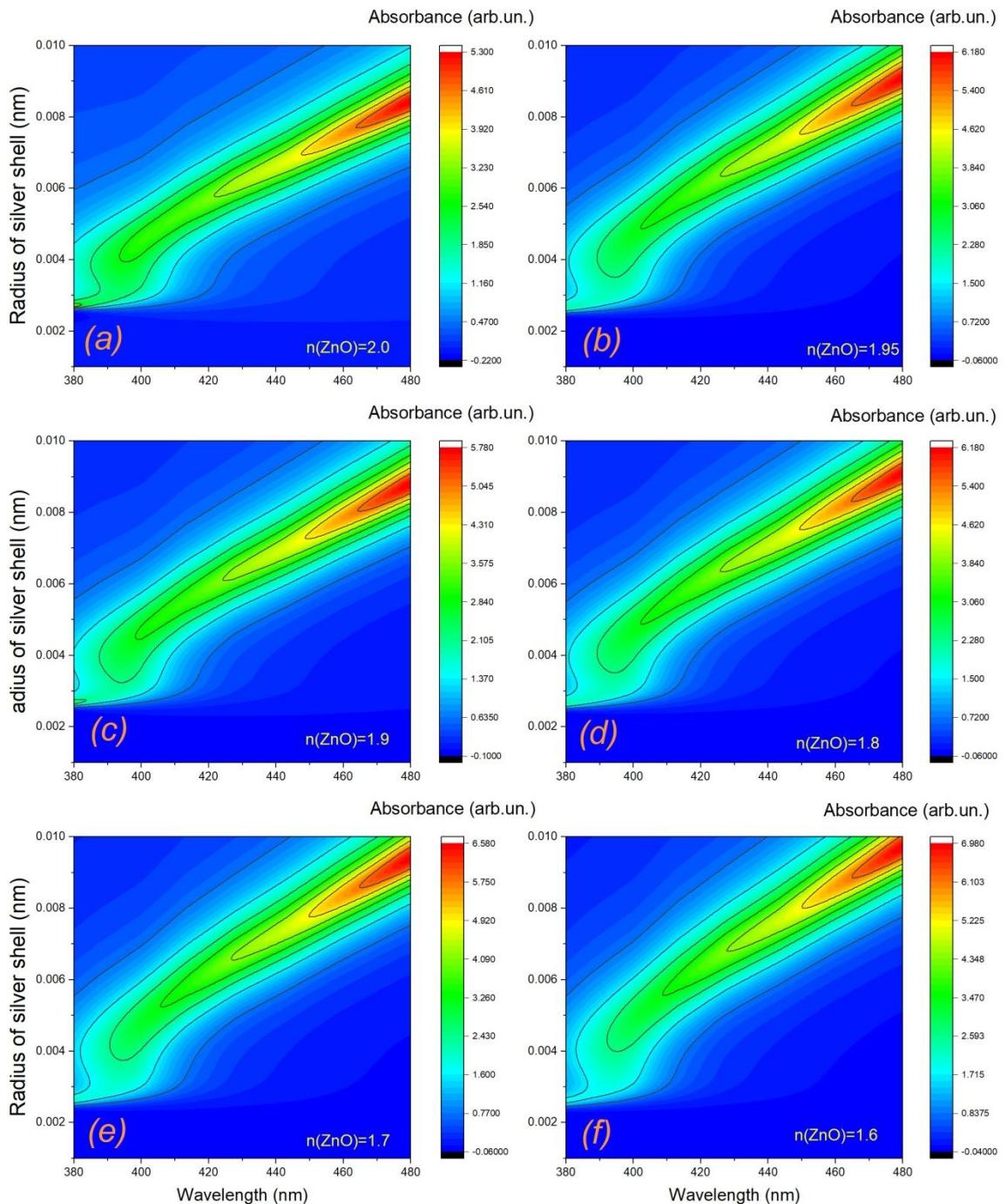


Fig. 1. Maps of modelled absorbance spectra of ZnO/Ag core/shell nanostructures for different refractive index of zinc oxide.

Temperature dependence of electron effective mass in InGaN quantum wells

Kaliuzhnyi V.V.^{1*}, Redko R.A.¹, Kolomys A.F.¹, Belyaev A.E.¹

¹*V. E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 45 Nauky Avenue, 03028 Kyiv, Ukraine*

Effective mass is a concept that describes behavior of charge carriers in crystalline structure under the influence of electric field as a way to simplify quantum equations. Effective mass depends on different factors, including temperature. Common experimental methods such as cyclotron resonance, measurement of Shubnikov – de Haas effect, of magnetophonon resonance (MPR) and have shown that effective mass decreases with increase of lattice temperature, which is consistent with the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ perturbation theory developed by Kane. Effective mass also can be obtained from optical methods such as optical Hall effect (OHE) and time domain spectroscopy (TDS). However, for gallium nitride (GaN) and GaN-based heterostructures, both optical methods demonstrate enhanced effective mass, namely in THz range of excitation (THz-OHE and THz-TDS). For temperatures above 150 K, effective mass increases up to $\approx 0.34m_e$ at T=300K[1], compared to methods mentioned before, where obtained effective mass is $\approx 0.2m_e$ for temperature range 77-300K.

The aim of the study is to employ another optical method, photoluminescence (PL), to determine effective mass of charge carriers. Emission of recombination of electron-hole pair depends on effective mass as parameter, and is observable up to room temperatures. The sample AlGaInN heterostructure with multiple quantum wells (MQWs). Two sets of QWs were grown on GaN buffer: $\text{In}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{N}$ (2.5 nm)/GaN(4 nm) buffer superlattice and $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{N}$ (2.5 nm)/GaN(9 nm) superlattice with five periods each. The parameters of multilayer system were determined by X-ray diffractometry, and the depth distribution was obtained using ToF-SIMS.

Two QWs-related peaks were obtained from PL spectra, 2.69 eV (active layer superlattice) and 3.08 eV (buffer superlattice), that are caused by recombination of electron-hole pairs. Intensity of these peaks was 30 times higher than the intensity from GaN buffer and other barrier layers, which may prove high effectiveness of carrier capture by the QWs.

The predicted energy of optical transitions between the first electron level (E_e) and a higher heavy hole level (E_h) in a QW is given by equation[2]:

$$h\nu_{e-h} = E_g - eF_{QW}L_{QW} + \left(\frac{9\pi\hbar e F_{QW}}{8\sqrt{2}}\right)^{\frac{2}{3}} \left[\left(\frac{1}{m_e^*}\right)^{\frac{1}{3}} + \left(\frac{1}{m_h^*}\right)^{\frac{1}{3}} \right], \quad (1)$$

where E_g is InGaN bandgap, and F_{QW} and L_{QW} are the strength of electric field in the quantum well induced by spontaneous and piezoelectric polarizations and effective width of the quantum well, respectively. Temperature dependence of PL peaks follows Varshni equation (2):

$$E_g = E_g(0) - \alpha \frac{T^2}{T + \beta}, \quad (2)$$

where $E_g(0)$, α , and β are fitting parameters. PL bands of superlattices follows this equation only at $T > 200$ K. At $T < 200$ K, PL peak of buffer superlattice is near constant, while PL peak of active region blue shifts at low temperatures. Such behavior can be explained by the localized state ensemble model. Assuming that electric field does not have significant temperature dependence for $T > 200$ K and adopt the confinement energies of heavy holes, we obtained temperature dependence of electron effective mass by solving Eq. (1), and is shown on the Fig. 1. It is evident that effective mass decreases with increase in temperature.

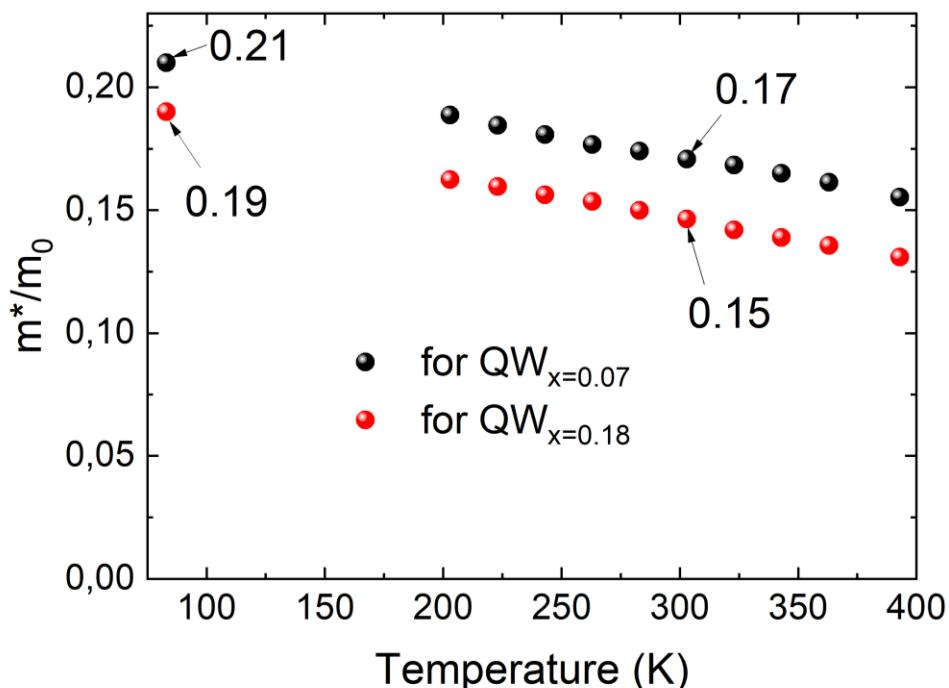


Fig. 1. Temperature dependence of electron effective mass in $In_xGa_{1-x}N/GaN$ multiple quantum wells

- [1] V. V. Koroteyev, V. A. Kochelap, V. V. Kaliuzhnyi, and A. E. Belyaev, “High-frequency conductivity and temperature dependence of electron effective mass in AlGaN/GaN heterostructures,” *Appl Phys Lett*, vol. 120, no. 25, Jun. 2022, doi: 10.1063/5.0093292.
- [2] R. Cingolani *et al.*, “Spontaneous polarization and piezoelectric field in quantum wells: Impact on the optical spectra,” *Phys Rev B Condens Matter Mater Phys*, vol. 61, no. 4, pp. 2711–2715, 2000, doi: 10.1103/PHYSREVB.61.2711.

**Секція 3.
Фізика
напівпровідниковых приладів**

**Section 3.
Physics of semiconductor devices**

КІНЕТИКА СТРУМУ В СКЛОКЕРАМІЧНИХ МАТЕРІАЛАХ НА ОСНОВІ VO_2

В.Р. Колбунов, М.П. Трубіцин, А.О. Дяченко

Дніпровський національний університет ім. Олеся Гончара,
пр. Науки, 72, Дніпро, 49010, Україна, e-mail: kolbunov_vadim@i.ua

Науковий і практичний інтерес до діоксиду ванадію VO_2 та матеріалам на його основі зумовлений фазовим переходом метал-напівпровідник (ФПМН), який спостерігається у VO_2 при температурі $T_t = 68^\circ\text{C}$ [1]. Склокерамічні матеріали на основі VO_2 та ванадій-фосфатного скла (ВФС) демонструють стрибкоподібну зміну електропровідності ($\sim 2\text{--}3$ порядка) в межах температури T_t та мають вольт-амперні характеристики S -типу з пороговим перемиканням [2]. Такі склокераміки можуть бути використані як матеріал для критичних терморезисторів та порогових перемикачів з робочим струмом до 10 А.

Найважливішу роль у функціонуванні критичних терморезисторів відіграють процеси перемикання струму через них при переході з високоомного стану (off-state) в низькоомний (on-state) і зворотно. Слід зауважити, що тривалість переходу з високоомного у низькоомний стан визначалася в ряді робіт, а даних про тривалість зворотного переходу після проходження імпульсу напруги вкрай мало.

Метою цієї роботи було вивчення зміни струму під час перемикання зразків VO_2 -склокераміки зі стану з високим опором (off-state) у стан із низьким опором (on-state) і зворотно. Затримка переходу з off-state в on-state, при застосуванні до зразка склокераміки перемикаючої напруги U_0 , пов'язана з часом t_{don} , необхідним для його розігріву до температури фазового переходу метал-напівпровідник у VO_2 . Час затримки t_{don} зменшується зі зростанням U_0 (рис. 1). Показано, що розрахункова залежність t_{don} від напруги U_0 , перебуває в хорошій відповідності з

з експериментальними даними (див. рис. 1).

Протягом деякого часу після зняття перемикальної напруги U_0 і подачі на зразок малої опорної напруги спостерігається спад струму. Така поведінка свідчить, що шнур струму з кристалітами VO_2 у металевій фазі зберігається протягом деякого часу після вимкнення перемикальної напруги. Отже, має місце

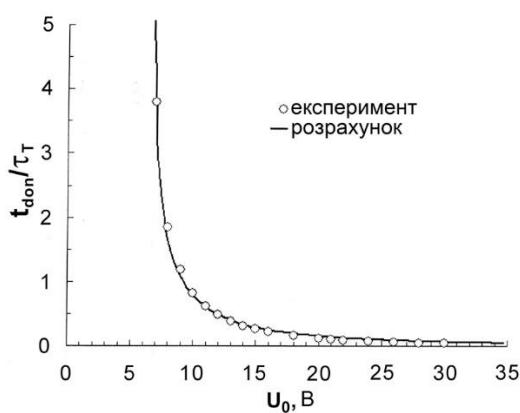


Рис. 1. Експериментальна та розрахункова залежності нормованого часу затримки перемикання зразка склокераміки на основі

затримка вимкнення t_{doff} зразків VO_2 -склокераміки, яка пов'язана з переходом зі стану *on-state* у стан *off-state*.

Встановлено, що затримку зворотного переходу з *on-state* в *off-state* контролює шнур струму, в межах якого кристаліти VO_2 склокераміки перебувають у металевій фазі. Час затримки t_{doff} цього переходу визначає час, упродовж якого в зразку VO_2 склокераміки існує шнур струму, після вимкнення напруги U_0 . Величина t_{doff} зростає при збільшенні U_0 (рис. 2). Причиною такої поведінки є розширення шнура струму зі зростанням U_0 . Як наслідок, збільшується кількість кристалітів VO_2 у металевій фазі. Тому t_{doff} зростає за рахунок збільшення часу, необхідного для розсіювання теплоти, що виділяється під час переходу кристалітів VO_2 з металевої фази в напівпровідникову фазу.

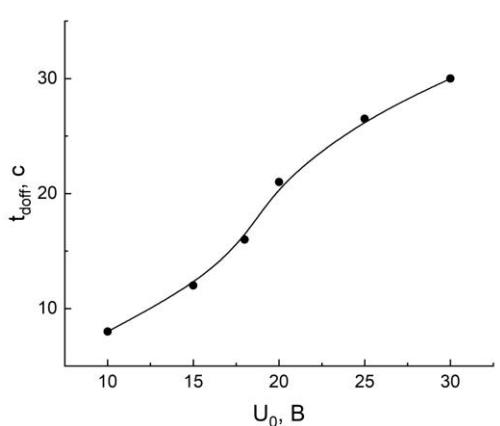


Рис. 2. Залежність часу затримки t_{doff} зразків VO_2 -склокераміки від напруги

Таким чином, в роботі встановлено, що затримка переходу з *off-state* в *on-state*, при застосуванні до зразка перемикаючої напруги U_0 , пов'язана з часом його розігріву до температури фазового переходу метал-напівпровідник у VO_2 . Час затримки такого переходу t_{don} зменшується зі зростанням U_0 . Показано, що розрахункова залежність t_{don} від напруги U_0 , отримана з використанням спрощеного рівняння теплового

балансу зразка і моделі "критичної температури", перебуває в хорошій відповідності з експериментальними даними. Встановлено, що затримку зворотного переходу з *on-state* в *off-state* контролює шнур струму, в межах якого кристаліти VO_2 склокераміки перебувають у металевій фазі. Час затримки t_{doff} цього переходу визначається часом існування шнура струму після вимкнення напруги U_0 , яка перевела зразок VO_2 -склокераміки в *on-state*. Величина затримки t_{doff} зростає при збільшенні U_0 . Причиною такої поведінки є розширення шнура струму зі зростанням U_0 .

- [1] W. Bruckner, H. Opperman, W. Reihelt, J. I. Terukow, F. A. Tschudnowski, E. Wolf. Vanadiumoxide: Darstellung, Eigenschaften, Anwendung. Akademie-Verlag, Berlin. 252 s. (1983).
- [2] Колбунов В.Р., Тонкошкур О.С., Вашерук О.В. Електропровідність термочутливої склокераміки на основі нанорозмірного діоксиду ванадія. Технологія та конструкції в електронній апаратурі, 2022, № 1–3. С. 39-41.

Gas-sensing properties of tin dioxide layers doped with platinum nanoparticles

V. Bilanych^{1,2}, S. Vorobiov², M. Bilanchuk¹, V. Kormosh¹, E. Mudra³, I. Shepa³, D. Kondrakhova², V. Komanicky²

¹Uzhorod National University, Pidhirna 46, Uzhorod 88000, Ukraine

²Pavol Jozef Šafárik University, Park Angelinum 9, Košice 04001, Slovakia

³Institute of Materials Research of SAS, Watsonova 47, 040 01 Košice, Slovakia

Tin dioxide (SnO_2) is effectively used to manufacture sensitive elements of gas sensors. It has good thermal stability, high sensitivity, and availability. One of the promising application areas for such sensors is medical diagnostic systems based on the analysis of human exhalation and identification of disease biomarkers. For example, acetone is considered the main biomarker of respiration in diabetes. It is necessary the sensor sensitivity at the micro- and nanolevel of concentrations when detecting such biomarkers. The use of additional catalysts into the gas-sensitive layer is an effective way to enhance of the gas sensors sensitivity.

The aim of this work was to study the effect of doping the initial SnO_2 powders with platinum nanoparticles on the sensitivity of sensors based on them in detecting micro- and nanoconcentrations of acetone in a humid-air-acetone gas mixture.

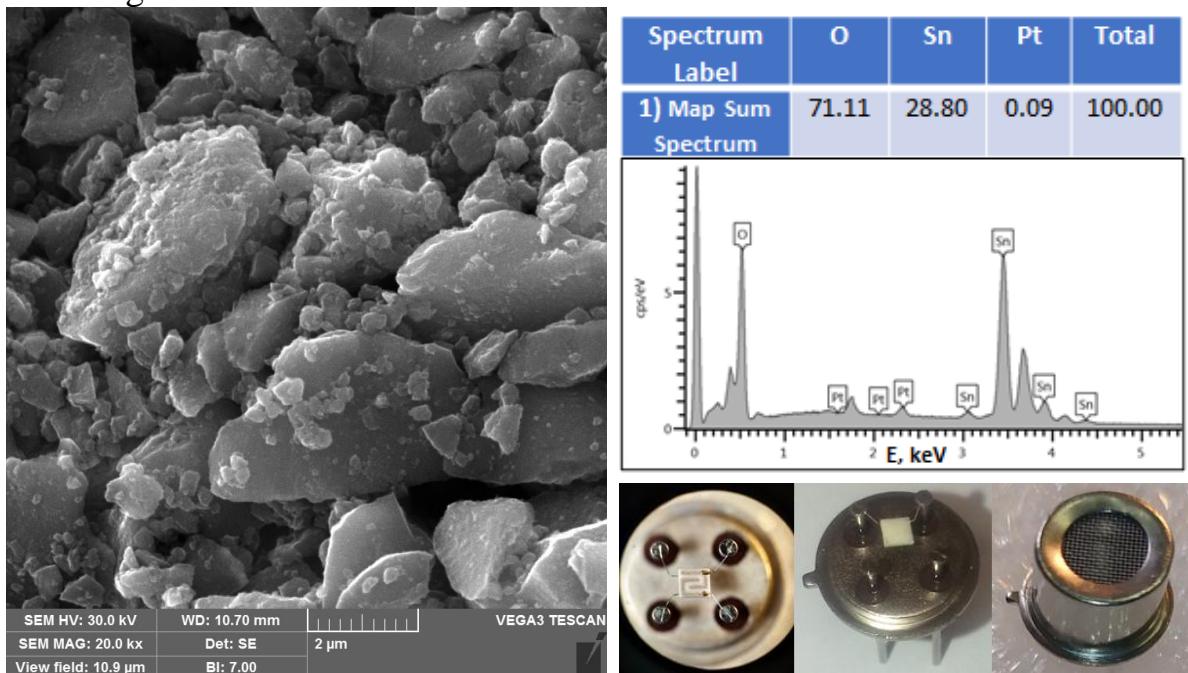


Fig. 1. Surface view of the gas-sensitive film (a); its chemical composition; the type of electrical contacts; the gas-sensitive film on the dielectric platform and the fabricated sensor (b.)

The method of thermal decomposition of SnSO_4 was used to obtain SnO_2 powder: $\text{SnSO}_4 \rightarrow \text{SnO}_2 + \text{SO}_2 \uparrow$. Chloroplatinic acid hexahydrate

$\text{H}_2\text{PtCl}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ was used to doped of SnO_2 powder with platinum nanoparticles.

An aqueous solution of H_2PtCl_6 was prepared in an amount corresponding to 0.1% Pt relative to SnO_2 . Then the SnO_2 powder was impregnated with this aqueous solution in an amount necessary to achieve the desired concentration of the Pt dopant. Gas sensors were then manufactured and the chemical composition of the gas-sensitive layer was measured using energy-dispersive X-ray spectroscopy (Fig. 1).

The main characteristics of the manufactured sensors were measured: resistance in air (R_0) and humid-air-acetone gas environment (R_g), response time and recovery time. The sensor sensitivity (response) was determined by the resistance ratio $G = R_0/R_g$. The response time (t_{res}) of the sensors was defined as the time to reach 90% of the output signal. The recovery time (t_{rec}) was defined as the time of the reverse change in 90% of the output signal after the cessation of exposure to acetone vapors.

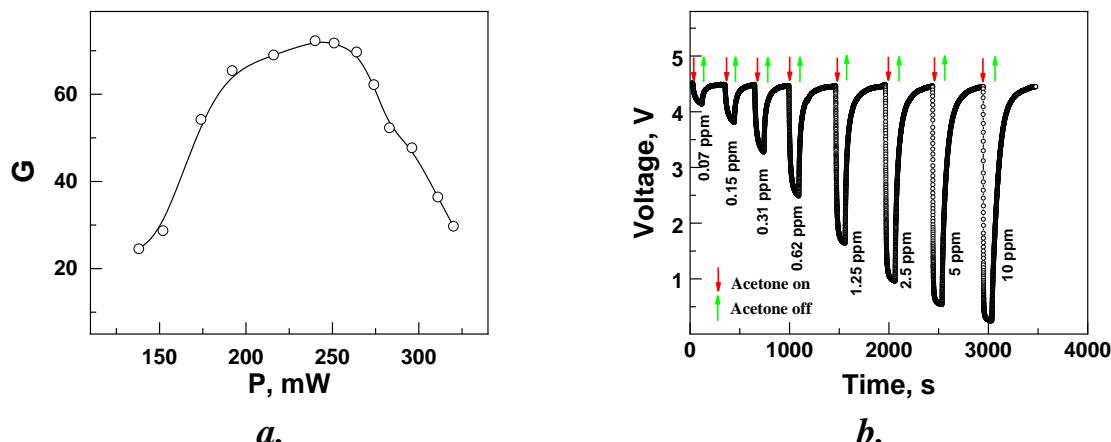


Fig. 2. Operating power and dynamics of sensor signal change at different concentrations of acetone in a humid-air-acetone gas environment .

When changing the consumed power of the heater, the maximum sensitivity ($G = 72$) of the SnO_2/Pt (0.2%) sensor is observed at 240 mW. It was found that the addition of 0.2 at.% Pt significantly increases the sensitivity of the sensors to acetone vapors. The mechanism of this effect is the formation of a Schottky barrier, which regulates the flow of electrons in the contact zone of Pt with SnO_2 . It is shown that with an increase in the concentration of acetone, a decrease in the adsorption times and an increase in the desorption times of the sensors are observed.

Acknowledgments.

This work has been supported by the grants EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V01-00096 grant of the Slovak Research and Development Agency under contract APVV-23-0049.

Express Assessment of the Electron Drift Velocity in Power 4H-SiC Schottky Diodes

O. M. Demenskyi, V. A. Krasnov, S. Yu. Yerchin

V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 76/78 Zavodskaya Str.,
Kherson, 73008, Ukraine, e-mail: o_demenskiy@isp.kiev.ua

One of the promising trends in modern semiconductor electronics is the development and commercial production of power Schottky diodes (SD) based on 4H-SiC polytype. Well-known advantages of SiC-made devices, as compared to conventional Si devices, allow to design rectifier diodes with blocking voltage up to 10 kV [1] and even higher. These devices are in high demand nowadays, in particular, in electric drive systems as well as in energetics. Such SDs ($n-n^+$ -type structure) operate under the action of high electric field within the n-base layer of the device ($>10^5$ V/cm). Therefore, the dependence of electron drift velocity in the base layer on the electric field intensity E is the important characteristic of both: the device itself and the semiconductor material of its base layer [2]. To study such dependencies, the simulation methods [3], the methods of processing of device experimental characteristics [4, 5] are used. In the work [5] the authors presented the procedure of assessment of electron drift velocity in a base layer of 4H-SiC SD. The experimental data is approximated with high accuracy by this procedure. However, in our opinion, the main drawback of the method presented is the usage of empirical parameters and dependencies, which narrows its application range.

The purpose of this work is to develop the express assessment technique of the field dependence of the electrons' velocity in a base layer of a SD, which would be mainly based on experimental data.

To achieve this purpose, in accordance with [6], we proposed to measure $C-V$ characteristic for determination of the punch-through voltage U_j and the capacity value $C_j=C(U_j)$ corresponding to it in addition to the usage of experimental $I-V$ characteristic of the device for the calculation procedure. While deriving the calculation formula we took into account the effect of unipolar injection of electrons from heavily doped n^+ -substrate into the diode base layer [5, 7] (the concentration of electrons being injected is directly proportional to the voltage applied [8]). The influence of a space charge of the injected carriers on the electric field distribution in the base layer was neglected. As a result, we obtained the expression for the dependence of electron drift velocity at the diode base layer on the electric field intensity $v(E)$ in the following form:

$$v(E) = \frac{I}{C_j(2E_j+kE)}, \quad (1)$$

where I is the diode forward current value, E_j is the electric field intensity in the base layer at the applied voltage $U=U_j$, k is the coefficient which characterizes the uniformity of injected carriers distribution in the diode base

layer [8].

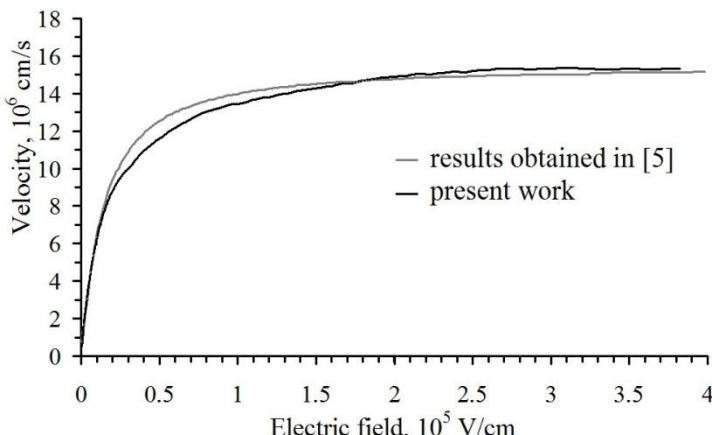
The technique was tested using source data of the work [5]. The resulting dependence $v(E)$ is shown in the figure. As it can be seen from the plot, the dependence $v(E)$ reaches saturation at the field intensity $E \sim 1.5 \times 10^5$ V/cm², the average value of saturated electron drift velocity $v_s \sim (1.5 \div 1.55) \times 10^7$ cm/s which agrees with the calculations in [5]. We should note that, unlike the technique described in [5], we have obtained these results without using empirical characteristics. Moreover, we used the only fitting parameter k , while in [5] there were three of them. Our further study has shown that our technique provides satisfactory agreement with experimental data even in the case of silicon power SD, i.e. it is versatile. Also it should be noted that the testing of our technique using the data from [5] has confirmed the fact that the value of $v_s \sim 1.55 \times 10^7$ cm/s along c axis is apparently the most close to the fundamental one for 4H-SiC polytype (see the reference list in [5]).

Let us show this. Here we consider that at such electrical fields, the saturated drift velocity of electrons approaches to the velocity limited by scattering due to optical phonons emission. Then v_s would make [9]:

$$v_s = \sqrt{\frac{8E_{LO}}{3\pi m^*}}, \quad (2)$$

where E_{LO} is the energy of longitudinal optical phonons, which makes ~ 104.3 meV [10], m^* is the effective mass of electrons in 4H-SiC at the room

temperature, $m^* \approx 0.62m_0$ ($m^* = m_{||}^*$) [11], in the conduction band minimum, m_0 is the mass of a free electron.



By substituting numerical values, we obtain $v_s \approx 1.59 \times 10^7$ cm/s (the deviation from the experiment makes $\sim 2.25\%$).

1. <https://www.wolfspeed.com/power/products/sic-schottky-diodes>
2. R. Mickevičius and J. H. Zhao, J. Appl. Phys. 83, 3161 (1998).
3. A. Akturk, N. Goldsman, S. Potbhare, A. Lelis, J. Appl. Phys. 105, 033703 (2009).
4. L. Ardaravičius, et al., Appl. Phys. Lett. 86, 022107 (2005).
5. P. A. Ivanov, et al., Semiconductors 50, 883 (2016).
6. B. O. Краснов, С. ІО. Єрохін, Патент України № 47826 U, 2010.
7. V. I. Sankin, A. A. Lepneva, Materials Science Forum 338-342, 769 (2000).
8. M. A. Lampert and P. Mark. Current injection in solids (Academic Press, 1970).
9. S. M. Sze and K. K. Ng, Physics of Semiconductor Devices, 3rd ed. (Wiley, Inc., 2007).
10. Properties of Silicon Carbide, ed. by G. L. Harris (INSPEC, London, 1995).
11. P. Käckell, B. Wenzien, F. Bechstedt, Phys. Rev. B. 50, 10761 (1994).

Виготовлення методом спрей-піролізу гетероструктур

FTO/n-Fe₂O₃/p-Cd_{1-x}Zn_xTe з діодними властивостями

Козярський І.П., Орлецький І.Г., Ілащук М.І., Майструк Е.В., Козярський Д.П.,
Варібок Р.В.

*Чернівецький національний університет імені Юрія Фельковича,
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58002, e-mail: i.koziartskyi@chnu.edu.ua*

Тонкі плівки оксиду заліза Fe₂O₃ знайшли широке практичне використання для виготовлення газових сенсорів, пристрійв фотоелектрохімічного розщеплення води, у пристроях зберігання інформації. Достатньо висока ширина забороненої зони ($E_g \approx 2.23$ еВ), яка є характерною для плівок Fe₂O₃, виготовлених методом спрей-піролізу [1] зумовлює їх застосування у світлоочутливих напівпровідникових гетеропереходах. Матеріали з подібними енергетичними властивостями (CdS, ZnSe, ZnS, MgZnO) успішно використовуються у сонячних елементах на основі телуриду кадмію як буферний шар між поглиначем світла (CdTe) і прозорим провідним оксидом (TCO).

В даній роботі досліджуються умови нанесення методом спрей-піролізу тонких плівок *n*-Fe₂O₃ та оксиду олова легованого фтором SnO₂:F (FTO), на кристалічні підкладки твердих розчинів Cd_{1-x}Zn_xTe *p*-типу провідності та аналізуються електричні властивості гетероструктури FTO/n-Fe₂O₃/p-Cd_{1-x}Zn_xTe.

Для виготовлення гетероструктур FTO/n-Fe₂O₃/p-Cd_{1-x}Zn_xTe використовували плоскопаралельні пластинки Cd_{1-x}Zn_xTe, отримані методом сколовання зі злитків твердих розчинів, вирощених вертикальним методом Бріджмена за невисокого тиску парів Cd. Кристали характеризувалися дірковим типом провідності. При $T = 295$ К їх кінетичні параметри: питома електропровідність $\sigma = 5.2 \cdot 10^{-2}$ Ом⁻¹·см⁻¹, концентрація дірок $p = 2.1 \cdot 10^{15}$ см⁻³ і їх холлівська рухливість $\mu_H = 55.6$ см²·В⁻¹. Гетеропереходи FTO/n-Fe₂O₃/p-Cd_{1-x}Zn_xTe виготовляли послідовним нанесенням тонких плівок Fe₂O₃ та FTO на поверхню нагрітих до температури $T_S = 400$ °С підкладок Cd_{1-x}Zn_xTe. Для цього використовували 0.1 М розчини солей гексагідрату хлориду заліза FeCl₃·6H₂O та пентагідрату хлориду олова SnCl₄·5H₂O у бідистильованій воді відповідно. Легування оксиду олова фтором забезпечували додаванням у розчин фториду амонію NH₄F. Товщина плівок, вимірювана мікроінтерферометром Лінника МІІ-4, становила $w \approx 0.3$ мкм. При піролізі утворюється бінарна сполука гематиту α -Fe₂O₃ *n*-типу провідності з питомим опором $\rho \approx 2.5 \cdot 10^6$ Ом·см при $T = 293$ К. Плівки FTO володіли електронною провідністю з низьким питомим опором $\rho \approx 2.0 \cdot 10^{-4}$ Ом·см при $T = 293$ К. За дослідженнями пропускання світла плівок Fe₂O₃ та FTO у видимій області на спектральній установці СФ-

2000, розрахунку і аналізу спектральної залежності коефіцієнта поглинання широта забороненої зони становить $E_g = 2.23$ еВ (Fe_2O_3) та $E_g = 3.9$ еВ (FTO), відповідно. При довжинах хвиль $\lambda > 0.65$ мкм плівки Fe_2O_3 характеризуються високим коефіцієнтом пропускання $T > 60\%$. Для плівки FTO коефіцієнт пропускання становить $T \approx 80\%$. Отримані результати свідчать про можливість використання плівок Fe_2O_3 в якості буферного шару фотоперетворювачів на основі CdTe, в яких фронтальним електродом є плівка прозорого провідного оксиду FTO.

Вольт-амперні характеристики (ВАХ) анізотипного гетеропереходу FTO/n- Fe_2O_3 /p- $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ в температурному інтервалі $T = 294 - 315$ К показані на рис.1.

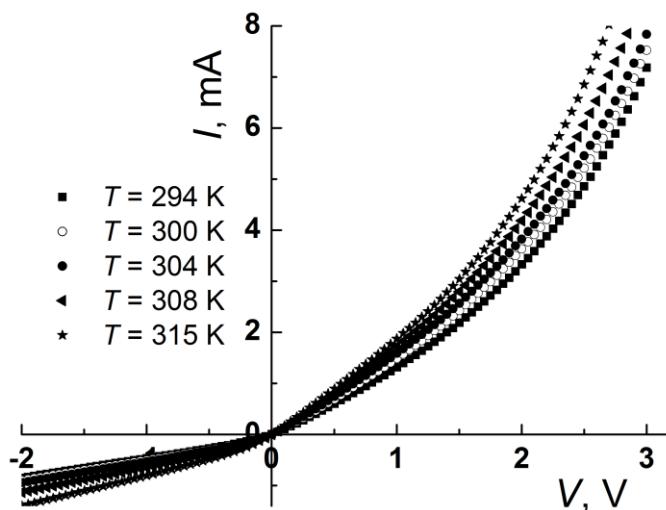


Рис.1. ВАХ гетероструктури FTO /n- Fe_2O_3 /p- $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$

Аналіз температурних залежностей ВАХ при прямих і зворотних зміщеннях та визначення основних механізмів перенесення струму крізь енергетичний бар'єр гетероструктури, проводився із використанням побудованої за моделлю Андерсона енергетичної діаграми. За співвідношенням значень термодинамічних робіт виходу FTO, n- Fe_2O_3 і p- $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ встановлено, що основний потенціальний бар'єр висотою $q\varphi_k \approx 0.76$ еВ формується в приконтактній області p- $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. При прямих зміщеннях гетероструктури струм утворюється тунельно-рекомбінаційними процесами за участю електронів зони провідності плівки Fe_2O_3 та енергетичних рівнів у забороненій зоні p- $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. При зворотних зміщеннях до 1.5 В генерація електронів з таких рівнів зумовлює протікання зворотного струму.

1. A.A. Akl, Optical properties of crystalline and non-crystalline iron oxide thin films deposited by spray pyrolysis, *Applied Surface Science*. 233 (2004) 307–319.

Surface Modification on the nanostructures TiO₂ and their applications in gas sensors

Kruglenko Ivanna, Snopok Borys, Burlachenko Julia
V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics NAS of Ukraine,
kruglen@isp.kiev.ua

Intelligent sensor systems are important both for ensuring the efficiency and environmental safety of industrial production and for improving the quality of life. Environmental problems, the need for clean materials, food control requirements, etc. cause a special interest in the sensor topic. The study of the properties of systems containing nanoscale objects is interesting and important both from the point of view of fundamental science and practical application in a number of new technologies. TiO₂ gas sensors are an n-type semiconductor, they can be used to detect water and ethanol, which is relevant for the chemical industry and biomedicine, chemistry and materials science. Titanium dioxide, or TiO₂, is one of the most popular materials for the sensitive layer [1]. Physically, this material has good characteristics of sensitivity, high temperature resistance, low cost and high stability. Studies of adsorption properties were carried out using mass-sensitive sensors - quartz resonators with a resonant frequency of 10 MHz [2]. The flow of molecules from the surface of the test substances was captured by the carrier gas (argon) at a constant rate, forming a gas sample. The study focused on modifying the QCM surface to improve the sensor performance using TiO₂ nanoparticles (sigma Aldrich) as a sensitive layer. TiO₂ nanoparticles were applied to the QCM surface using the droplet method. 7 µl of solution was applied to the quartz surface on both sides, the adsorption time was from 60 min. until the solution dried naturally in the chamber. Adsorption occurs due to the presence of numerous active sites on the surface covered with nanoparticles. After saturation is reached, any additional ethanol molecules will have a lower probability of adsorption. Desorption can occur when the concentration of ethanol in the environment decreases, when ethanol molecules leave the surface and break hydrogen bonds. Ethanol molecules (CH₃CH₂OH) have a polar hydroxyl group (-OH) and a non-polar ethyl group (CH₃CH₂-). – ethanol molecules are initially adsorbed on the surface through hydrogen bonds and dipole-dipole interactions. This phase is represented by a Langmuir-type adsorption isotherm. The characteristics of gas sensors are determined by the physicochemical properties of their sensor elements, which, in turn, depend on the crystal structure, composition and adsorption properties of the sensitive layers of the sensor array. On the surface of the TiO₂ sensor, the selectivity of these sensors to a mixture of ethyl alcohol and

water with different percentages (25, 50, 75 % ethanol in water) was studied (Fig. 1).

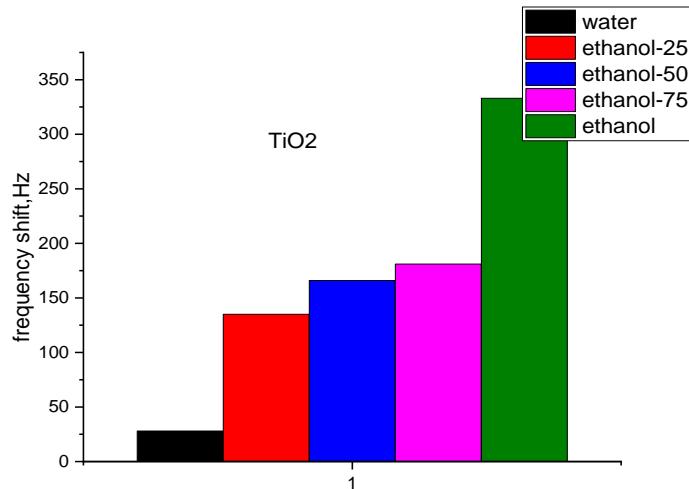


Fig.1. Histogram of vapors adsorbed on the surface of TiO_2

Using the unique chemical and physical properties of nanomaterials, research was conducted to study the effect of vapors of different nature (water, ethanol and their mixture) on the surface of a quartz resonator. The characteristics of gas sensors are determined by the physicochemical properties of their sensor elements, which in turn depend on the crystal structure, composition and adsorption properties of the sensitive layers of the sensor array. Analysis of sensor responses makes it possible to evaluate kinetic curves for all types of samples. At room temperatures, ethanol and water show monotonic curves throughout the entire experiment. Despite the fact that the adsorption properties of nanostructured coatings require further and more in-depth research, at this stage it is already possible to conclude that they are promising as sensor coatings.

- [1] M. Procek, A. Stolarczyk, T. Pustelny, E. Maciak, "A study of a QCM sensor based on TiO_2 nanostructures for the detection of NO_2 and explosives vapours in air," Sensors, vol. 15(4), pp. 9563-9581, 2015.
- [2] Kruglenko I., Snopok B., Sensors and Actuators B: chemical 106, I.1, pp.101-113, 2005

Порівняльна характеристика тонкоплівкових фотоелементів на основі CZTS та CIGS

Криховецький М.В., Яворський Р.С., Никируй Л.І., Глеб В.Ф.

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна.
e-mail: maksym.krykhovetskyi.22@rnu.edu.ua*

У роботі розглядається порівняльна характеристика тонкоплівкових сонячних елементів на основі $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) та $\text{Cu}(\text{In},\text{Ga})\text{Se}_2$ (CIGS) використовуючи основні параметри: коефіцієнт перетворення, стабільність, собівартість та екологічність. Наведено аналіз перспектив використання кожного з матеріалів у комерційних та дослідницьких цілях.

Сучасні тонкоплівкові фотоелементи є перспективною альтернативою кремнієвим сонячним елементам завдяки низькій вартості виробництва та можливості виготовлення гнучких панелей. Серед них найбільший інтерес викликають матеріали CZTS та CIGS, які мають високий коефіцієнт поглинання сонячного випромінювання та можливість оптимізації [1]. Відмінність від традиційних кремнієвих фотоелементів полягає у використанні тонкоплівкової технології, яка дозволяє зменшити витрати матеріалу, що призводить до зменшення кінцевої вартості пристрою. Кремнієві елементи мають вищу ефективність і довговічність, проте їх виробництво є дорожчим та енергозатратним.

Останнім часом активно почали досліджувати тонкоплівкові сонячні елементи на основі CdTe [2]. На даний момент максимальна ефективність лабораторного зразка становить 22,1% [3]. Окрім цих матеріалів досліджують також тонкоплівкові елементи на основі CIGS, які демонструють коефіцієнт корисної дії (ККД) до 23%, у той час як CZTS має ККД на рівні 10–12% [4]. Причиною цього є втрати під час рекомбінації носіїв заряду та дефекти у структурі CZTS. CIGS відзначається високою стабільністю в умовах експлуатації, тоді як CZTS має певні проблеми, пов'язані з фазовою нестабільністю та деградацією при тривалому використанні.

З економічної точки зору CZTS містить недорогі й поширені елементи (Cu , Zn , Sn , S), тоді як CIGS містить дорогий індій та галій, що ускладнює масштабне виробництво. Важливо також зазначити, що CIGS-технологія вже комерційно реалізована, тоді як CZTS поки що знаходиться на стадії активних досліджень і потребує оптимізації для підвищення ефективності. Сучасні методи модифікації складу та вдосконалення виробничих процесів можуть сприяти підвищенню ефективності CZTS до рівня, який зробить його конкурентоспроможним із CIGS.

У контексті екологічності CZTS є більш безпечним, оскільки не містить токсичних елементів, таких як кадмій або селен, які використовуються у CIGS. Використання екологічно чистих матеріалів є важливим фактором у розвитку відновлюваної енергетики, оскільки сприяє зменшенню негативного впливу на довкілля. Крім того, відходи виробництва CZTS легше утилізуються, що робить його більш привабливим для масового використання в майбутньому.

Хоча CIGS маєвищий ККД і стабільність, його виробництво дорожче та менш екологічне порівняно з CZTS. Подальші дослідження в напрямку оптимізації CZTS можуть значно підвищити його ефективність, що зробить цей матеріал привабливішим для комерційного використання. Удосконалення виробничих технологій та впровадження нових підходів до підвищення стабільності тонкоплівкових сонячних елементів відкривають нові перспективи для застосування CZTS у відновлюваній енергетиці.

Література:

1. Wang, A., He, M., Green, M. A., Sun, K., & Hao, X. (2023). A Critical Review on the Progress of Kesterite Solar Cells: Current Strategies and Insights. *Advanced Energy Materials*, 13(2), 2203046. <https://doi.org/10.1002/aenm.202203046>
2. Yavorskyi, R., Saliy, Y., Nykyruy, L., Wisz, G., Adamiak, S., Cieniek, B., ... & Yavorskyi, Y. (2023). Thermally evaporated CdTe thin films on glass and (100) silicon substrates for solar cells applications. *Applied Nanoscience*, 1-13. <https://doi.org/10.1007/s13204-023-02886-3>
3. Green, M. A., Dunlop, E. D., Hohl-Ebinger, J., Yoshita, M., Kopidakis, N., & Ho-Baillie, A. W. Y. (2020). Solar cell efficiency tables (version 56). *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 28(7), 629-638.
4. Jackson, P., Hariskos, D., Wuerz, R., Kiowski, O., Bauer, A., Friedlmeier, T. M., & Powalla, M. (2016). Properties of Cu(In,Ga)Se₂ solar cells with new record efficiencies up to 22.6%. *Physica Status Solidi (RRL)—Rapid Research Letters*, 10(8), 583-586.

Вузькосмугові випромінювачі середнього інфрачервоного діапазону

В.П. Кислий, В.О. Мороженко, Ю.Г. Серъожкін

Інститут фізики напівпровідників НАН України ім. В.Є. Лашкарьова

проспект Науки, 41, Київ, 03028, E-mail: kyslyj@ukr.net

Інфрачервоні випромінювачі широко застосовуються для систем газоаналізу, моніторингу навколошнього середовища, дефектоскопії, системах контролю якості продукції та багатьох інших галузях. Із-за квантових обмежень люмінесцентні джерела випромінювання не функціонують в середній та дальній інфрачервоній (ІЧ) областях спектру, тому для цих областей є актуальною розробка нелюмінесцентних (теплових) джерел випромінювання. Зокрема перспективним для ІЧ джерел є використання напівпровідникових фотонних структур, спектр теплового випромінювання (ТВ) яких складається із серії спектральних ліній, а їх інтенсивність може сягати інтенсивності ТВ чорного тіла - тобто перевищує інтенсивність ТВ некогерентних тіл з аналогічними оптичними і фізичними параметрами. При цьому діаграма спрямованості випромінювання цих структур має пелюстковий характер.

Розроблена теорія випромінювальної властивості фотонних структур, показує що спектральні лінії їх ТВ залежать від товщини шарів та їх оптичних характеристик. Очевидно, що для підвищення інтенсивності ТВ необхідно підвищувати нагрів випромінювального елементу, а отже він повинен мати, крім необхідних оптичних та електрофізичних характеристик, механічну та хімічну стійкість при підвищених температурах. Виходячи з цих критеріїв, для досліджень були вибрані плівкові напівпровідникові резонаторні інтерференційні структури Ge/ZnS/Al на підкладинці із лейкосапфіру, на задній стороні якої було нанесено резистивний нагрівач. Такі структури мають три паралельні межі розділу – три дзеркала, які формують ТВ одного активного випромінюючого шару (Ge). Така структура дозволяє значно розширити можливості отримання спектрів випромінювання з заданою відстанню між смугами випромінювання та їх напівшириною. Положення смуг випромінювання (максимумів інтерференційних осциляцій) в спектрі, в свою чергу, визначається товщинами шарів d і їх показниками заломлення n .

ТВ виготовлених структур Ge/ZnS/Al розігрітих до 360 К, яке розповсюджувалося в області нормалі до поверхні структури, реєструвалося Фур'є-спектрометром в діапазоні 4.5 - 17 мкм – в спектральній області поглинання світла вільними носіями заряду в Ge.

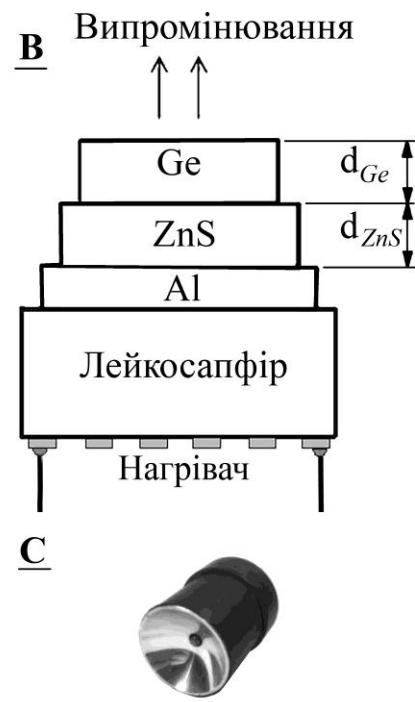
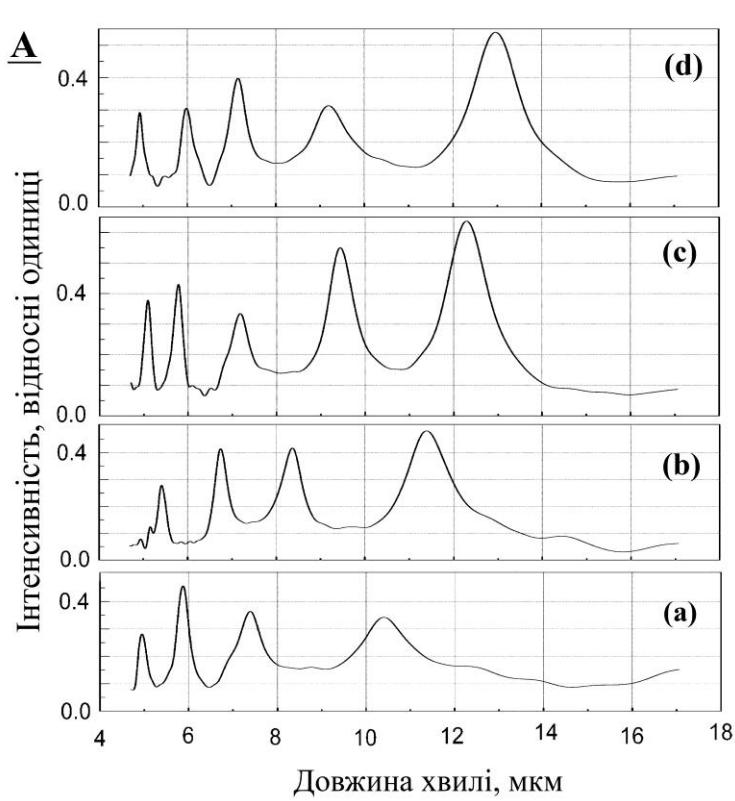


Рис.1. **A** – спектральні залежності випромінювальної здатності структур Ge/ZnS/Al. $T = 360$ К. **(а)** - $d_{Ge} = 2.60$ мкм, $d_{ZnS} = 1.30$ мкм; **(б)** - $d_{Ge} = 2.70$ мкм, $d_{ZnS} = 1.76$ мкм; **(с)** - $d_{Ge} = 2.67$ мкм, $d_{ZnS} = 2.32$ мкм; **(д)** - $d_{Ge} = 2.27$ мкм, $d_{ZnS} = 3.11$ мкм; **B** – схема резонаторного багатошарового випромінювального елементу; **C** – діюча модель вузькосмугового джерела ІЧ випромінювання.

12

Як видно з Рис.1., спектральне положення ліній випромінювання залежить від товщин шарів Ge та ZnS. Зміна товщини кожного з них призводить до посування ліній випромінювання в червону або синю область спектру. Таким чином підбором матеріалу, кількості і товщини шарів резонаторної структури можна створити вузькосмугове ІЧ джерело із лінією випромінювання, що відповідає лінії поглинання конкретного газу для вирішення конкретної задачі. Структура **(а)** може використовуватися для виявлення метану та вуглекислого газу оскільки має лінії випромінювання 7.71 мкм та 10.55 мкм, які припадають на смуги поглинання CH_4 та CO_2 відповідно.

[1] O.G. Kollyukh, A.I. Liptuga, V. Morozhenko, V.I. Pipa. Effect of the optical characteristics of semiconductor resonator structures on the amplitudes of their thermal radiation lines. Opt. Commun., 260, pp. 607-613 (2006).

ПІДХОДИ ДО ІНТЕЛЕКТУАЛІЗАЦІЇ СЕНСОРІВ, ПОБУДОВАНИХ НА ОСНОВІ РІЗНИХ ФІЗИЧНИХ ПРИНЦИПІВ

Я. Лепіх, А. Карпенко, А. Балабан

Науково-дослідний інститут фізики при Одеському національному університеті імені
І. І. Мечникова
e-mail: ndl_lepikh@onu.edu.ua

Однією з задач сенсорної електроніки на даному етапі її розвитку є інтелектуалізація сенсорів, що обумовлюється також необхідністю забезпечення інформаційних систем, особливо інтелектуального рівня, сигналами високої якості в режимі он-лайн.

При підході до вирішення цієї задачі треба брати до уваги певну відмінність сенсорів, які базуються на різних фізичних принципах. Зокрема, напівпровідникові сенсори різного функціонального призначення, особливістю яких є аналоговий (струмовий) сигнал і класи сенсорів, які мають вихідний сигнал частотного виду, такі, наприклад, як акустоелектронні на поверхневих чи об'ємних акустичних хвильях (ПАХ). Фізичні основи роботи тих і інших сенсорів відомі.

Ці відмінності проявляються при інтелектуалізації сенсорів, зокрема, в тому, що напівпровідникові вимагають додаткової обробки первинного аналогового сигналу при трансформації його в цифровий вигляд.

Така додаткова обробка сигналу зазвичай призводить до певної втрати якості сигналу, а, крім того, вимагає додаткового застосування відповідної елементної бази.

В цьому основна відмінність структурних, схемотехнічних і алгоритмічних рішень інтелектуалізації (рис. 1).

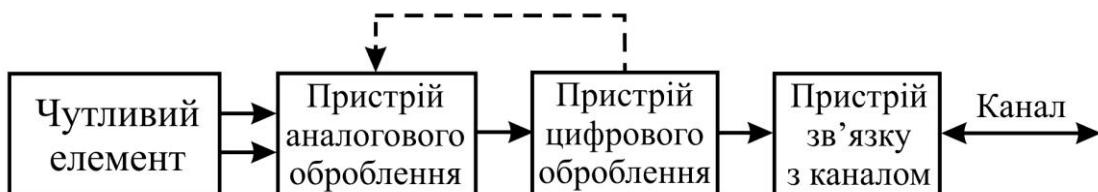


Рис. 1. Структура інтелектуального сенсора

У випадку сенсора на ПАХ структурна схема спрощується внаслідок відсутності необхідності в аналоговій частині, що показано пунктиром. Тобто після аналогового оброблення сигналу послідуючі блоки інтелектуалізації сенсорів і інтеграції в інформаційні системи принципово не відрізняються та визначаються в основному досвідом і смаком розробника і вибором елементної бази.

В інтелектуальному сенсорі напівпровідникового типу до аналогової частини, що підсилює, нормує і фільтрує сигнал чутливого елемента, підключають цифрову частину, створену на базі мікропроцесорів із вбудованою архітектурою. При цьому цифрова частина не лише забезпечує якісне оброблення сигналів і виявлення відмов апаратних засобів сенсора, а й організує обмін інформацією через мережні канали інформаційно-вимірювальних систем. Останні в кінцевому етапі виконують функції, що зазвичай реалізується на мікро-ЕОМ вищого рівня і здійснюють градуювання, оцінку результатів вимірювання, самодіагностику, програмування архітектури, формування, упакування і передавання інформації з мережних каналів тощо.

Functional devices and sensors based on plasmon-polariton photodetectors

S.V. Mamykin, Yu.M. Lyaschuk, I.Z. Indutnyi, V.I. Myn'ko, V.R. Romanyuk,
I.B. Mamontova, R.A. Redko, M.G. Dusheyko, Ye.M. Savchuk, V.O. Tochkovyi,
O.V. Shtykal, D.A. Kuznetsova

V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 41 Nauky Ave., Kyiv, 03028, Ukraine, E-mail: mamykin@isp.kiev.ua

Plasmon-polariton photodetectors (PPPDs) are promising elements for creating various functional devices, particularly highly sensitive sensors and detectors [1, 2]. Their operation is based on the phenomenon of surface plasmon resonance (SPR), which occurs at the interface between a metal and a dielectric (or semiconductor) and allows for the efficient conversion of incident light energy into the energy of surface plasmon-polaritons (SPPs) or localized plasmons (LPs) [3]. SPR excitation is usually achieved using diffraction gratings (DGs) formed on the surface or within the device [1], which are used for the matching the wave vectors of the SPP and light.

This report presents the results of the development, fabrication, and investigation of PPPDs and devices based on them. Structures based on a p-n junction in silicon [1, 2] or a Schottky barrier on GaAs [4] with a metallic (Au or Al) diffraction grating are considered. Interference lithography (IL) using chalcogenide photoresists [1, 3] and direct laser nanostructuring of semiconductor surfaces using femtosecond laser pulses (highly regular laser-induced periodic surface structures, HR-LIPSS) [4-6] have been considered for the forming of DGs.

The optical properties of the fabricated gratings and PPPDs were analyzed using spectroscopy of reflection/transmission of polarized light, photocurrent measurements, Raman spectroscopy, and photoluminescence (PL) [1, 3, 4]. The possibility of controlling the type of excited plasmon modes (SPPs or LPs) by changing the grating geometry (modulation depth, slit width) is demonstrated [3]. A significant (up to 12 times) enhancement of photoluminescence during laser processing of Au-GaAs structures was demonstrated, which is associated with increased light absorption and reduced surface recombination, important for photovoltaic applications [4].

Particular attention is paid to the development of sensor devices. RCWA modeling for optimization of parameters for PPPDs based on aluminum as a cost-effective alternative to gold were performed [1]. Experimental samples of Al-PPPDs with optimal parameters (period 633 nm, relief depth 50 nm, fill factor 0.36, intermediate Al layer thickness 14 nm) were fabricated. They demonstrate characteristics (polarization sensitivity $I_p/I_s=8$, spectral FWHM 50-100 nm, angular FWHM $\Delta\theta=5^\circ$, sensitivity 0.04-0.06 A/W) comparable to those of Au-based PPPDs [1, 2].

The application of PPPDs for creating sensors is demonstrated. A sensor for detecting uranium in water based on an HR-LIPSS grating on Si, coated with Au and functionalized with polydopamine (PDA), was developed and tested, showing high sensitivity ($\sim 1.0 \times 10^{-7}$ g of uranium per cm^2 of the sensor surface) [5]. An increase in the efficiency of LP based sensors using Au nanoparticles deposited on HR-LIPSS compared to planar substrates was also shown [6].

A design for a dust-insensitive smoke detector based on PPPD has been developed and patented [2, 7]. The principle of operation is based on the high sensitivity of SPR to changes in the refractive index of the medium caused by smoke particles and the relative insensitivity to much larger dust particles [2]. The detector uses two laser diodes to register the shift of the photocurrent resonance (either by angle of incidence or by wavelength). The insensitivity of the developed detector to dust, humidity, and temperature fluctuations has been experimentally confirmed [2]. The achieved characteristics of optimized PPPDs ($I_p/I_s = 3\ldots 8$, photocurrent FWHM 50...200 nm (spectral) and $5\ldots 10^\circ$ (angular), $I_{ph} = 0.04\ldots 0.1 \text{ A/W}$) [1, 2] confirm their potential for creating compact, reliable, and potentially inexpensive smoke detectors [2, 7].

Thus, PPPDs based on metal diffraction gratings demonstrate significant potential for creating functional optoelectronic devices, including high-efficiency sensors and detectors for various applications.

1. Lyaschuk, Y., et al. Aluminum-Based Plasmonic Photodetector for Sensing Applications. *Appl. Sci.* **2024**, *14*, 4546. doi:10.3390/app14114546
2. Mamykin, S.V., et al. Dust-insensitive smoke detector based on plasmon-polariton photodetector. *Semicond. Phys. Quantum Electron. Optoelectron.* **2024**, *27*(4), 466-471. doi:10.15407/spqeo27.04.466
3. Dan'ko, V., et al. Au gratings fabricated by interference lithography for experimental study of localized and propagating surface plasmons. *Nanoscale Res. Lett.* **2017**, *12*, 190. doi:10.1186/s11671-017-1965-4
4. Dmytruk, I.M., et al. The influence of ultrafast laser processing on morphology and optical properties of Au-GaAs composite structure. *Semicond. Phys. Quantum Electron. Optoelectron.* **2024**, *27*(3), 261-268. doi:10.15407/spqeo27.03.261
5. Mamykin, S.V., et al. Femtosecond laser nano-structuring for surface plasmon resonance-based detection of uranium. *Appl. Surf. Sci.* **2022**, *576*, 151831. doi:10.1016/j.apsusc.2021.151831
6. Gnilitskyi, I., et al. Laser Nanostructuring for Diffraction Grating Based Surface Plasmon-Resonance Sensors. *Nanomaterials* **2021**, *11*, 591. doi:10.3390/nano11030591
7. Mamykin S.V., et al. Dust-insensitive smoke detector based on a plasmon-polariton photodetector. *Patent of Ukraine No. 155999*. Publ. 24.04.2024, Bull. No. 17. <https://sis.nipo.gov.ua/uk/search/detail/1796684/>

Realization of dynamic thermal radiation control from photonic structure by contact injection.

V.O. Morozhenko, V.V. Chernenko.

V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of the NAS of Ukraine, 41 Prospect Nauky, Kyiv, Ukraine.

Currently, infrared radiation sources are used extensively in researches, systems of gas analysis, spectroscopy, medicine etc. While LEDs are used successfully in the near-infrared ($\lambda < 2 \mu\text{m}$) region, their quantum yield decreases sharply in the mid-wavelength and long-wavelength infrared spectral regions. Application of quantum wells and superlattices make it possible to shift the LEDs spectral characteristic to longer wavelengths (up to $\lambda \approx 10 \mu\text{m}$) and even to create LEDs with a two-colour spectral characteristic [1]. However, such LEDs operate at cryogenic temperature, which causes significant difficulties in their application. Therefore, the modern optical infrared (IR) systems need controllable narrowband sources of IR emission, that is, those that can operate in pulsed or pulse-frequency modes. A promising concept of the problem solution is to use non-luminescent (thermal) emitters with emissivity that can be changed under external influences. At the same time, wide possibilities in the implementation of the thermal type controlled narrowband IR sources are opened up by using photonic structures (PS) as emitting elements [2]. They are capable of creating highly directional thermal radiation in a narrow spectral range, and with an appropriate PS design, the emission line intensity can practically reach the intensity of the radiation of an absolutely blackbody. In [3], it was proposed and demonstrated the non-luminescent magnetically controllable sources of infrared emission based on the semiconductor magneto-photonic structures.

The paper presents the experimental results of studies of possibility to control the coherent TR by contact injection of free current carriers. A 5x5 mm section of Si solar cell was used as PS. The solid back contact also served as an optical mirror, increasing the Q factor of the resonator. The structure was located on a massive holder, which served as a thermal stabilizer. Its temperature was maintained close to 375 K. Since the spectral measurements were performed at constant currents, at high input powers the thermal stabilizer was cooled by an air flow. In other cases, it was heated by an electric heater. The TR spectrum of a structure consisted of a series of clear spectral lines. However, since the thickness of the structure is $l \gg \lambda$, the interference pattern of TR is quite dense.

Fig. 1 shows the experimental dependences of the amplitudes (P) of three emission lines on a current (I). For ease of comparison and analysis, they are normalized to their maximum value. The behaviour of the dependence $P(I)$ of the line with $\lambda_{\max} = 10.128 \mu\text{m}$ (curve 1) has a clearly

expressed maximum at $I \approx 6.5$ A. At this current, the resonator quality factor is still quite high, and the injected nonequilibrium holes increase the number of spontaneous intraband emission events. At currents of $I > 7$ A, the high

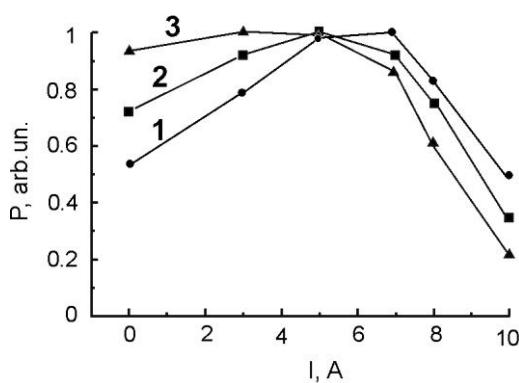
injection level already significantly worsens the resonator quality factor. This leads to the suppression of interference and a decrease in the amplitude of the radiation line. For lines with a longer wavelength, the rise of the dependence of $P(I)$ is less steep, and their maxima are observed at lower current values (curves 2 and 3). This is explained by the dispersion of the absorption of free current carriers. As the line wavelength increases, the initial (equilibrium) transmittance decreases and the maximum value of the radiation line amplitude is achieved at a lower injection level (current). The results

Fig.1. Experimental dependences of the amplitudes of TR lines on a current. Spectral position of the line:
1 - 10.128 μ m; 2 - 12.073 μ m;
3 - 14.168 μ m.

are consistent with the theoretical ones [3]. According to the theory, with larger values of wavelength the dependence $P(I)$ will lose its non-monotonic character and will be decreasing.

Thus, the work experimentally demonstrates the efficiency of controlling the characteristics of the coherent TR of semiconductor photonic structures by contact injection. This method makes it possible to modulate the amplitude of the emission line in frequency or pulse mode. Such emitters can be used in the gas analyzers, optical devices for determining the composition of substances and identifying organic compounds, for calibrating IR receivers and optical systems in narrow spectral ranges, in detection systems of thermal objects etc.

1. M. Aziz, C. Xie, V. Pusino, A. Khalid, M. Steer, I. G. Thayne, D. R. S. Cumming. Multispectral mid-infrared light emitting diodes on a GaAs substrate. *Appl. Phys. Lett.* 2017. **111**. P. 102102-1 - 102102-5. DOI: [10.1063/1.4986396](https://doi.org/10.1063/1.4986396)
2. M. F. Picardi, K. N. Nimje, G. T. Papadakis. Dynamic modulation of thermal emission—A Tutorial. *J. Appl. Phys.* 2023. **133**. P. 111101. DOI: [10.1063/5.0134951](https://doi.org/10.1063/5.0134951).
3. E.F. Venger, V.O. Morozhenko. Narrowband controllable sources of IR emission based on one-dimensional magneto-optical photonic structures. *SPQEo*. 2023. **26** (2), P. 180-187. DOI:10.15407/spqeo26.02.180.



Перетворення теплової енергії в електричну при фотомагнітному ефекті

В.П. Кислий, В.Й. Піпа

Інститут фізики напівпровідників НАН України ім. В.Є. Лашкарьова

проспект Науки, 41, Київ, 03028, E-mail: kyslyj@ukr.net

Попит на енергетику зумовлює активний пошук нових методів генерації енергії. Зокрема, в роботі [1] показано, що фотодіоди можуть генерувати електроенергію під дією на них дефіциту фотонів (ДФ) по відношенню до їх числа при термодинамічній рівновазі, використовуючи холодний темний космос. В даній роботі теоретично та експериментально досліджено отримання напруги при фотомагнітному ефекті (ФМЕ) в ситуації, коли ДФ виникає, як і в [1], під дією радіаційного контакту з холодним середовищем. Отримання напруги, зумовленої ДФ, було експериментально продемонстровано в роботі [2], у якій ДФ при ФМЕ створювався джерелом негативної люмінесценції.

Досліджувалася генерація напруги в тонкій прямокутній пластині InSb. Ребра широких граней, l_x, l_z , значно перевищували товщину пластини $l_y = d$ і характерну довжину хвилі теплового випромінювання, тому можна враховувати обмін випромінюванням з навколоишнім середовищем тільки через її широкі грані. Пластина з температурою T К була розміщена між полюсами магніту так, що силові лінії магнітного поля, $\vec{H} = (0, 0, H)$, входили в її тонкі грані; лише одна широка грань пластини знаходилася в радіаційному kontaktі з холодним тілом з температурою $T_1 < T$. За допомогою елемента Пельтьє температура T_1 могла знижуватися на 20 градусів відносно температури T .

Розраховуємо напругу в напівпровіднику з власною провідністю, електрони і дірки не вироджені, мають ізотропні закони дисперсії. Нерівноважні концентрації електронів і дірок, $n = p$, розподілені квазінейтрально і мало відрізняються від рівноважної, n_i . Довжина пластини l_x велика в порівнянні з біополярною дифузійною довжиною L ; при цій умові фото добавка $n_l = n - n_i$ і електричне поле E_x не залежать від x . Пластина оптично товста, реалізується поверхневе фотозбудження. Під дією радіаційного контакту на поверхні пластини $y=0$ за 1 с генерується поверхнева концентрація пар носіїв заряду $g_0 = \frac{(1-R)}{2\pi^2 c^2 \eta^3} [F(T_1) - F(T)]$, де R - коефіцієнт відбивання випромінювання від поверхні при нормальному падінні, $F(T) = (k_B T)^3 [1 + a + \frac{a^2}{2}] e^{-a}$, $a = \frac{E_g}{k_B T}$, $E_g(T)$ - ширина забороненої зони. Для фотомагнітної напруги, $U = l_x E_x mV$, в лінійному наближенні по $\Delta n = n(0) - n(d)$ отримуємо:

$$U = -\frac{3 \cdot 10^5 l_x g_0 (1 + h_{np}) H}{cn_i (Z\bar{d} - h_{np} C_E)}, \text{ де } Z = (1 + s_1 s_2) sh\bar{d} + (s_1 + s_2) ch\bar{d}, \quad s_1 = s_0 L/D, \quad s_2 = s_d L/D$$

$$, \quad \bar{d} = d/L, \quad C_E = 2(1 - ch\bar{d} - s_2 sh\bar{d}) + (s_2 - s_1) sh\bar{d}, \quad D = \frac{2k_B T \mu_n \mu_p}{e(1 + h_{np})(\mu_n + \mu_p)},$$

$$h_{np} = \mu_n \mu_p (H/c)^2.$$

Тут s_0 і s_d - швидкості безвипромінювальної рекомбінації на поверхнях пластиини $y=0$ і $y=d$, μ_n та μ_p - рухливості електронів і дірок, k_B - постійна Больцмана, e - величина заряду електрона.

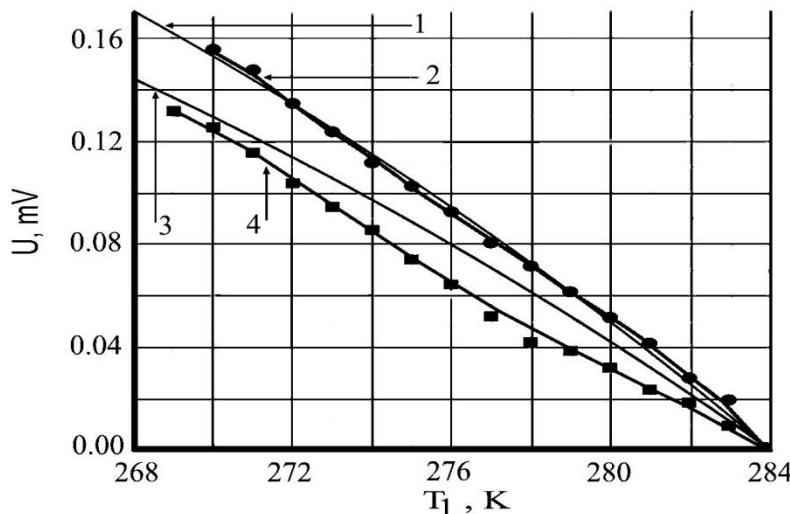


Рис.1. Залежність фотомагнітної напруги від температури холодного випромінювача: 1, 3 – теоретичний розрахунок 2, 4 – експеримент. Криві 1, 2, – $H = 6.5$ кЕ, а криві 3, 4, – $H = 5.5$ кЕ. Пластина InSb ($N_a - N_d = 5 \cdot 10^{13}$ см $^{-3}$) розмірами $10 \times 2 \times 0.07$ мм, $s_0 = 100$ см/с, $s_d = 2 \cdot 10^3$ см/с, $\tau_0 = 2 \cdot 10^{-5}$ с (час життя носіїв при лінійній рекомбінації). Параметри: E_g , n_i , μ_n , μ_p при $T=284$ К визначалися з їх температурних залежностей [3].

Використання теплового випромінювання об'єктів з нижчою температурою, зокрема нічного неба, для генерації електроенергії є перспективним, але малорозвиненим напрямком відновлюваної енергетики. Така технологія дала б унікальну можливість виробництва енергії вночі, доповнюючи можливості сонячної енергетики.

[1] Masashi Ono, Parthiban Santhanam and Shanhui Fan, Thermal-to-electrical energy conversion by diodes under negative illumination, Phys.Rev. B 93, 161410(R) (2016).

[2] В.І. Пипа, Е.І. Яблоновский Е.І., В.К. Малютенко, Фотомагнітний ефект в умовах дефіцита фотонов, ФТП, 24, 1175 (1990).

[3] Otfried Madelung. Semiconductors. Data Handbook. Springer Berlin, Heidelberg, 2012.

Absorption of one-layer and two-layer macroporous silicon.

V.F. Onyshchenko, L.A. Karachevtseva

V.Ye. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, 41 Nauki Ave., Kyiv, 03028, Ukraine, E-mail: onyshchenkovf@isp.kiev.ua

Absorption increases due to reduced reflection. Reflection decreases due to pores or structures on the surface. Macroporous silicon is used as a photonic crystal, photodetector and solar cell [1]. The concentration of excess charge carriers depends on their effective lifetime [2]. Absorption of macroporous silicon and bilateral macroporous silicon increases due to reduced reflection and multiple reflections between the surfaces of macroporous silicon [3].

The absorption of one-layer and two-layer silicon is increased by optimizing the porosity in each macroporous silicon layer. The macroporous silicon layers are considered as an effective medium with a complex effective refractive index. When calculating the absorption of the two-layer macroporous silicon, multiple reflections between the surfaces of the monocrystalline substrate and between the surfaces of each macroporous silicon layer were taken into account. The absorption of one-layer and two-layer macroporous silicon was optimized by the gradient descent method. The gradient descent method finds the porosity in each macroporous silicon layer at which the absorption of the two-layer macroporous silicon is the largest.

The figure shows the absorption spectrum of one-layer, two-layer macroporous silicon and, for comparison, single-crystal silicon. The calculations were made for a layer (layers together) with a thickness of 1 μm . The medium of the macroporous silicon layers is considered effective, and is described by a complex effective refractive index. The thickness of single-crystal and porous silicon is 500 μm . The layers of macroporous silicon have different porosity due to different diameters of macropores. The distance between the pores remains the same. The diameter of the macropores of the second layer of macroporous silicon can be larger or smaller than the diameter of the macropores of the first macroporous layer. The absorption of single-crystal silicon does not exceed 0.7, for light wavelengths from 0.3 μm to 1.2 μm . Such a small absorption is due to the reflection of the single-crystal silicon. Macroporous silicon has a greater absorption, which is due to a decrease in reflection from the frontal surface. The figure shows that the reflectance of macroporous silicon does not exceed 0.83 and is uniform for wavelengths from 0.3 μm to 1 μm . The decrease in reflection is due to the fact that the effective refractive index of the porous silicon layer is lower than that of single-crystal silicon. Two-layer macroporous silicon has more absorption than one-layer macroporous silicon. The absorption of two-layer macroporous silicon with optimized porosity in each layer of macroporous silicon does not exceed 0.87 - 0.9. The figure shows that the reflection spectrum increases

more in the short-wavelength range of waves. The absorption of single-layer and two-layer macroporous silicon differs by the same amount, equal to 0.04.

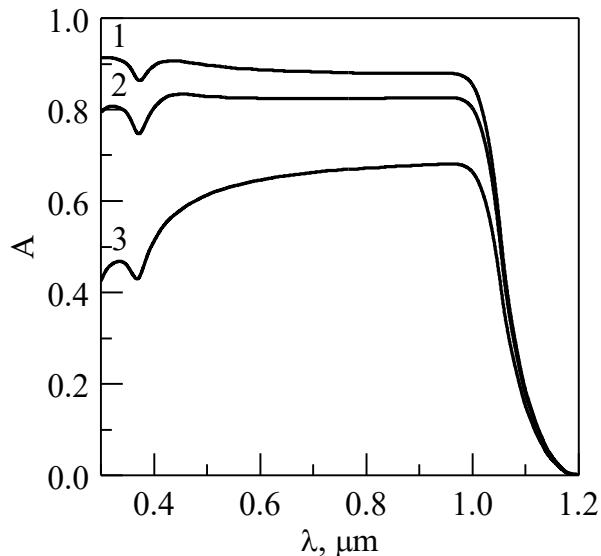


Fig. Absorption spectrum of one-layer (2), two-layer macroporous silicon (1) and single-crystal silicon (3). The thickness of the layer (layers together) of macroporous silicon is 1 μm .

The absorption of two-layer macroporous silicon with optimized porosity in each porous silicon layer exceeds the absorption of single-crystal silicon and one-layer macroporous silicon with optimized porosity in the wavelength range of light from 0.3 μm to 1.2 μm . Optimization of porosity leads to a decrease in reflection from the surfaces of bilayer macroporous silicon and an increase in its absorption. Increasing the number of surfaces resulted in reduced reflection and increased absorption. This was due to the reduction in the refractive index difference between air and the first layer of macroporous silicon, between the two layers of macroporous silicon, and between the second layer of macroporous silicon and the monocrystalline substrate.

1. L.A. Karachevtseva, O.O. Lytvynenko, V.F. Onyshchenko, O.Yu. Sapelnikova. Photonic structures of macroporous silicon / Ed. L.A. Karachevtseva. – Kyiv: Interservice, 2024. – 260 pp.: 154 ill. (in Ukrainian).
2. V.F. Onyshchenko Effective minority carrier lifetime in double-layer macroporous silicon. J. Nano- Electron. Phys. – 2024. – V. 16, N 4. P. 04026–7. [https://doi.org/10.21272/jnep.16\(4\).04026](https://doi.org/10.21272/jnep.16(4).04026).
3. V.F. Onyshchenko Transmission and Absorption of Bilateral Porous Silicon with Macropores or Nanowires. J. Nano- Electron. Phys. – 2024. – V. 16, N 2. P. 02008–7. [https://doi.org/10.21272/jnep.16\(2\).02008](https://doi.org/10.21272/jnep.16(2).02008).

Дослідження параметрів коливань мін або інших прихованих в землі об'єктів при взаємодії із зовнішнім акустичним опроміненням

Борковська Л.В.¹, Кислий В.П.¹, Мороженко В.А.¹, Серъожкін Ю.Г.¹, Соловйов Є.А.¹, Настич В.М.²

¹Інститут фізики напівпровідників ім. В.С. Лашкарьова НАНУ, Київ.

проспект Науки, 41, Київ, 03028, E-mail: yuriy.serozhkin@isp.kiev.ua

²Казенне підприємство спеціального приладобудування «Арсенал», Київ.

Ідентифікація прихованих у глибині ґрунту мін, особливо пластикових, є найактуальнішою проблемою гуманітарного розмінування. Серед методів, які можуть вирішувати цю проблему, лазерно-акустичний метод демонструє високу ймовірність виявлення мін і низький рівень помилкових спрацьовувань [1]. Спосіб полягає в збудженні коливань ґрунту (сейсмічних хвиль) при опроміненні акустичними хвилями в діапазоні частот 50 ...500 Гц та вимірюванні вібраційних характеристик поверхні ґрунту за допомогою лазерного допплерівського віброметра.

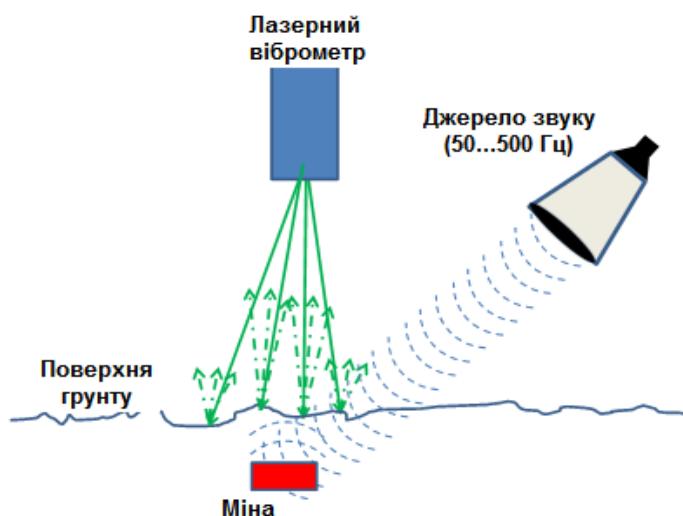


Рис. 1. Схема лазерно-акустичного методу пошуку прихованих об'єктів (мін).

Взаємодія закопаного у ґрунті об'єкта з пружними хвилями землі викликає його вібрацію. Внаслідок механічних резонансів та більшої механічної пружності об'єкта в порівнянні з сусіднім ґрунтом амплітуда та спектр коливань ґрунту безпосередньо над об'єктом відрізняються від амплітуди та спектру коливань навколої території. Прихований у ґрунті об'єкт виявляється за відмінностями вібрації поверхні. Спектральні характеристики акустичного відгуку залежать від типу об'єкту, тобто від його розмірів, пружних властивостей корпусу та ін.

В роботі аналізуються спектри акустичного відгуку поверхні ґрунту з прихованими муляжами мін ПМН-2, ПФМ-1 та гранати ПІРО-5Г з метою оцінки можливості ідентифікації вибухових пристрой. Муляжі були занурені на глибині 15-20 мм в сухому або вологому піску або субстраті, що складався із суміші торфу, піску та вапнякового матеріалу. На Рис.2 наведені спектри коливань мін.

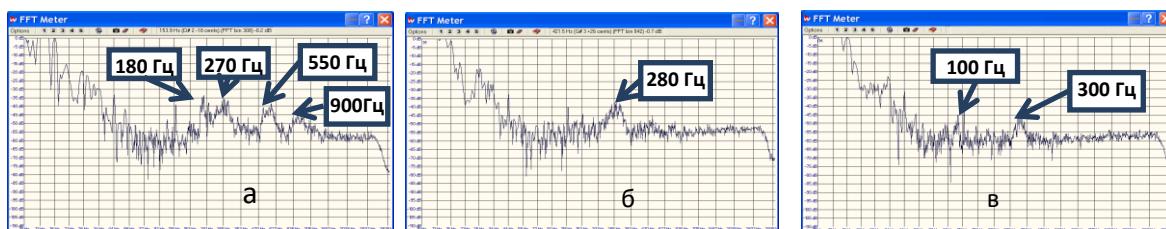


Рис. 2. Спектри коливань муляжів мін під дією акустичною білого шуму. а - ПМН-2; б - ПФМ-1, в - граната ПІРО-5Г.

Результати досліджень коливань муляжу міни ПФМ-1 у вологому піску наведені на Рис. 3.



Рис. 3. Спектри коливань муляжу міни-пелюстка ПФМ-1 у вологому піску під дією акустичного білого шуму. а - спектр коливань вологого піску, б - спектр коливань міни ПФМ-1, в - спектр коливань піску над міною.

На Рис.3а представлена спектр коливань поверхні піску у відсутності міни. Сигнали з частотами менше ніж 50 Гц є апаратними. Відгук на частоті 170 Гц для вологого піску швидше за все пов'язаний з механічними властивостями ґрунту. З Рис. 3б та Рис. 3с видно, що частоти коливань вільної міни та міни, яка занурена у ґрунті, значно відрізняються. Цей факт необхідно розглядати при спробі ідентифікації мін по частоті відгуку.

Робота виконується в рамках проєкту 2023-04/0088 НФДУ

1. Laser multibeam differential interferometric sensor for acoustic detection of buried objects, Vyacheslav Aranchuk, Ina Aranchuk, Brian Carpenter, Craig Hickey. Optical Engineering, Vol. 62, Issue 2, 024103 (February 2023). <https://doi.org/10.1117/1.OE.62.2.024103>.

The behavior of advanced silicon diode thermometers under the influence of magnetic field at low temperature range

Shwarts Yu. M., Shwarts M. M., Belyaev O. E., Sokolov V. M.

V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of NAS of Ukraine, 03028 Kiev,
Ukraine

Currently, one of the urgent tasks of modern semiconductor thermometry is the creation of interchangeable thermometers for operation in the low/high temperature range under the influence of extreme factors. Such thermometers are widely in demand in a variety of practical applications, including space and rocket technology, cryogenic technology, scientific experiments, low-temperature engineering. At the same time, interchangeable commercial silicon diode thermometers (SiDTs) have limited use in the low temperature range, as they are susceptible to self-heating and electrical instabilities, as well as magnetic fields and radiation.

In this paper, we present the results of experimental studies of our developed advanced silicon diode thermometers (AdvSiDTs) in the magnetic fields up to 14 T. The magnetic field dependences of the magnetoresistance (MR) of AdvSiDTs were studied to determine the possibility of their use under the influence of magnetic fields at low temperatures. The current flow mechanisms are analyzed.

Silicon chips of AdvSiDTs were fabricated by means of planar-diffusion industrial technology. The current-voltage characteristics (CVCs) were measured in the temperature range of 4.2-300 K and in the current interval from 10^{-10} A to 10^{-2} A. Thermostabilization of the samples is realized in liquid helium vapor with the error which did not exceed ± 0.05 K. Measurement errors for the current was within ± 5 %.

The measurements of TRCs have been carried out on the automated metrological UGT-A stand at the ISP NASU in the range of 4.2-300 K. The accuracy of calibration is ± 30 mK. The uncertainty of excitation current is not worse than ± 0.05 % for the currents used of 1 μ A, 10 μ A, and 100 μ A. Measurements of the CVCs and MR of AdvSiDTs in the temperature range of 1.5-4.2 K and magnetic fields up to 14 T were carried out on the equipment of the International Laboratory of High Magnetic Fields and Low Temperatures (Wroclaw, Poland). The error in temperature control using a Cernox thermometer did not exceed ± 0.03 K.

Based on the obtained experimental data, the mechanisms of current flow (taking into account the contribution of diffusion, generation-recombination, tunneling current and non-ohmic Mott hopping conductivity) under the influence of temperature and electric field are considered. The proposed model allows us to explain the influence of the operating current value on the type of TRC and non-monotonicity and the presence of a sensitivity maximum in the low-temperature range.

Under studying the effect of a magnetic field on AdvSiDTs, the following features were found (Fig. 1): (1) low negative MR in weak magnetic fields, (2) in the region of positive MR, its field dependence changes from quadratic to root; (3) there is no effect of the sensor orientation in the magnetic field on the MR value. Within the used magnetic fields of up to 14 T, the MR of the DST does not exceed 6%. In the mode of minimizing the self-heating effect, the error in measuring helium temperatures, caused by the influence of a magnetic field of up to 5 T, does not exceed 4%.

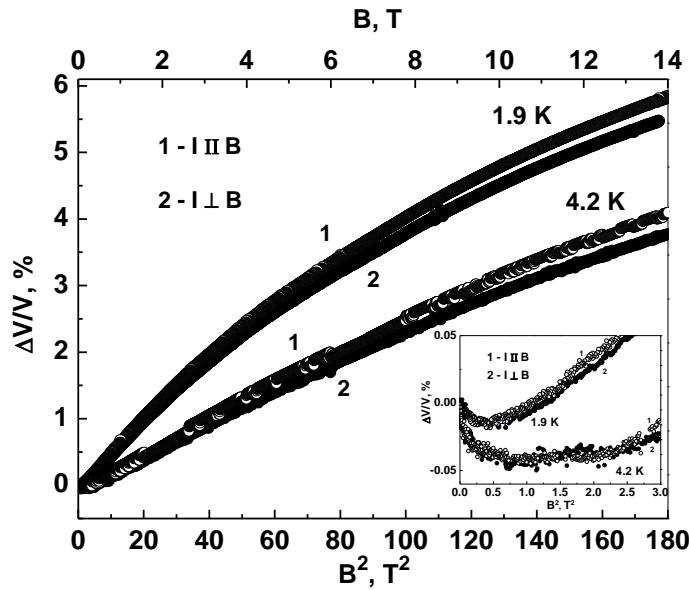


Fig. 1. Magnetic field dependences of the AdvSiDT magnetoresistance, measured at temperatures of 1.9 K and 4.2 K. $I=1\ \mu A$.

Thus, the developed sensors presented in this paper have the following advantages compared to well-known commercial SiDTs (manufactured by the Lake Shore Cryotronics, Inc., Scientific Instruments, Inc., Cryogenic Control Systems, Inc., Omega Engineering, Inc.): (1) In the AdvSiDTs, the influence of current instabilities on sensor characteristics has been eliminated at any selected operating current, which solves the problem of increasing the efficiency of temperature control with the required high measurement accuracy in the low-temperature region; (2) The AdvSiDTs have expended cryogenic application possibilities taking into account the requirements for minimizing thermal dissipation power and/or increasing the signal-to-noise ratio; (3) The AdvSiDTs are suitable for operation at low temperatures and under the influence of strong magnetic fields. In this case, there is no influence of the orientation of the AdvSiDTs in a magnetic field on the MR value.

Detectors and Sources Features for THz Imaging, Communication and Biomedicine applications

F. Sizov,

*V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, Nat. Acad. of Sci. of Ukraine
41, Nauky Ave., Kyiv 03028, Ukraine*

The spectral range for terahertz (THz) radiation from $\nu \approx 10\ldots0.1$ THz ($\lambda \approx 30\text{ }\mu\text{m}$ to $\lambda = 3\text{ mm}$) is the area for researches that encompass the different spheres of applications. Out of these applications, a few are in security screening and surveillance, astronomy, spectroscopy, biomedicine, food and package inspection, detection of concealed weapons, vision through camouflage, etc. The increasing demand for the fast transmission of large amounts of data leads to the extension of operation frequencies in communications, toward the THz frequency range.

Being nonionizing in nature, THz radiation penetrates many dielectric materials like plastics, ceramics, cardboard or dry gypsum plasterboard allowing a non-destructive and contact-free testing. The THz medical imaging technologies can provide guidance for surgeons in delimiting the margins of tumors, help clinicians to visualize diseased area, etc.

Up to two to three decades ago, the THz range was relatively complicated for its potential applications because of the difficulty in providing suitable sources and detectors. The cause was in that if the THz range is approached from the low-energy (mm waves) side, then there is a difficulty of realizing the appropriate circuits, including antennas, to handle signals at this high frequency range of electromagnetic radiation. If the THz range is approaching from the infrared (IR) side, then one of the problems was design of detectors and sources circuits and optical systems as well, with suitable materials and dimensions noticeably exceeding the wavelength.

Nowadays, a shift from the scientific to more application-oriented research and development is observed. However, despite the potential wide area of applications for the development of THz technologies, they meet a number limitations that are connected, e.g., with such factors as the cost of components, vision and spectroscopic systems able to probe large areas in a limited time. The relatively low output power of existing compact THz sources and the moderate or low sensitivity of detectors (primarily uncooled) require further development. Strong atmosphere absorption prevent many THz long distance applications.

Scientific and particularly application activities in the THz technologies have immensely increased in the last two decades especially in development and research of different types of detectors and sources based on new materials rapidly proposed (e.g., 2D materials). However, though promising for a wide range of applications (e.g., imaging, communication, spectroscopy, sensing, etc.), the THz instrumentation has not yet gained its potential due to a lack of cost-effective, portable, and efficient technologies.

In the report proposed, the attempt is undertaken to describe, though by no means exhaustive, overview of the current state of THz detectors and sources research, and to show the difference in some aspects of their applications. Therewith, it is impossible to do a full assessment to any of them, and it is inevitable that some important areas of research and applications have been missed.

ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНІ СВІТЛОВИПРОМІНЮВАЧІ НА ОСНОВІ ГЕТЕРОШАРІВ α , β -ZnSe

Сльотов М.М., Сльотов О.М., Кінзерська О.В., Савчук О.Ю.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича
вул. Коцюбинського 2, м. Чернівці, 58002, Україна

Актуальною проблемою твердотільної електроніки є розширення функціональних можливостей використовуваних приладів. Для них важливим є стабільність і повторюваність характеристик та властивостей при екстремальних умовах експлуатації. На даний час особливого значення набувають джерела ефективного випромінювання. За технологічними умовами їх отримання формуються висока ефективність випромінювання і його спектральний діапазон, що особливо важливо для мало опанованої короткохвильової області. Зазначене можливо отримати у випадку прямозонних II-VI сполук. Проте залишається мало вивченим стійкість їх властивостей до впливу високих температур. До того ж, матеріали з нетиповими кристалічними модифікаціями не дозволяють отримувати стабільні параметри і характеристики гетерошарів при вирощуванні епітаксією.

Встановлено можливість отримання гетерошарів ZnSe методом ізовалентного заміщення (ІВЗ). Визначено оптимальні умови вирощування гетерошарів (ГШ) ZnSe як типової кубічної β модифікації, так і нетипового гексагонального α -ZnSe. Останні неможливо вирости зі стабільними у часі властивостями за відомими класичними методами вирощування II-VI сполук. Визначені режими ізотермічного відпалу у парах елементів Se і Zn базових кристалів β -ZnS, α -CdSe і α -CdS у вакуумованих кварцових ампулах. Отримано гетероструктури β -ZnSe/ β -ZnS, α -ZnSe/ α -CdS і α -ZnSe/ α -CdSe. За проведеними дослідженнями їх електрофізичних, оптичних і люмінесцентних властивостей встановлено їх високу стабільність і повторюваність. Важливим для практичного використання є їх повторюваність при зміні температур у діапазоні 300-480 К. При цьому їх аналогічні властивості отримувалась на широко використовуваних кристалах β -ZnSe.

Властивості випромінювання визначалися за відомими стандартними методами досліджень фотolumінесценції (ФЛ). Проводилися комплексні дослідження властивостей за вимірюваннями ФЛ N_{ω} , оптичного пропускання T_{ω} і відбивання R_{ω} . Такий комплекс дозволяє встановити як зонну структуру шарів, так і відповідні для них генераційно-рекомбінаційні процеси. За ними визначалися властивості отриманих матеріалів, їх параметри та характеристики при зміні умов експлуатації. Відповідну роздільну здатність вимірювачів та чутливість до зміни умов використання забезпечувало використання λ -модуляції поряд із класичними дослідженнями.

Вимірювання показали, що при нагріванні до 480 К інтенсивність випромінювання ГШ β -ZnSe/ β -ZnS зменшується на 50-60 %. За аналогічних умов, люмінесценція широко використовуваних кристалів β -ZnSe і переважаючої більшості II-VI сполук зазнає практично повне гасіння. Для гетерошарів гексагонального α -ZnSe встановлено стійкість характеристик ФЛ, як і у випадку β -ZnSe. Її інтенсивність зменшується лише на 20 % при дії високих температур. При $T = 500 \div 550$ К інтенсивність люмінесценції шарів α -ZnSe становить близько 18% від початкової. Вказані властивості свідчать про домінуючу роль ізоелектронних пасток. Вони формують глибокі рівні. Саме на них локалізуються екситони, що пояснюють температурну стійкість їх рекомбінації. Висока температурна стабільність властивостей є важливою передумовою їх практичного використання. Природа центрів обумовлена характером процесів при IВЗ. За ними має місце епітаксія “усередину речовини”, а короткодіючий потенціал IВД обумовлює зв’язування на них електронів (чи дірок). Відповідно хвильова функція істотно деформується і локалізується поблизу IВД. Такі стани стійкі до впливу високих температур. Зазначимо, що характер спектрального розподілу випромінювання β -ZnSe/ β -ZnS, α -ZnSe/ α -CdS і α -ZnSe/ α -CdSe гетероструктур практично не змінюється при нагріванні у вказаному діапазоні температур. Спектри випромінювання характеризуються максимумом $\lambda_m = 0,439$ мкм для α -ZnSe, $\lambda_m = 0,46$ мкм для β -ZnSe, зміна положення якого при нагріванні відповідає величині температурного коефіцієнта зміни ширини забороненої зони dE_g/dT . Він визначався за температурними дослідженнями оптичного поглинання та відбивання (для α -ZnSe визначено $dE_g/dT = 5,3 \cdot 10^{-4}$ еВ/К). Характер випромінювання не змінюється, а спектри визначаються складовими за участю домінуючих процесів анігіляції зв’язаних екситонів в області $\hbar\omega \leq E_g$ і міжзонних переходів носіїв заряду при енергії фотонів більших за E_g . Зазначені механізми випромінювальної рекомбінації визначені за характерними для них властивостями. Складові спостерігаються у диференційних спектрах λ -модульованого випромінювання N'_ω . Для міжзонного випромінювання в області $\hbar\omega \geq E_g$ – інтенсивність змінюється з рівнем збудження L за характерною залежністю $I \sim L^2$, а положення максимуму не змінюється при варіації L в межах трьох порядків величини. Його інтенсивність зазнає більш стрімкого спаду порівняно з низькоенергетичним діапазоном $\hbar\omega \leq E_g$. Для нього характерним є залежність положення максимуму $\hbar\omega_m$ від інтенсивності збудження L та інтенсивності випромінювання за законом $I \sim L^{1.5}$. Зазначимо, що при збільшенні T візуально колір випромінювання змінюється від синього ($\lambda \sim 0,44$ мкм) до зеленого ($\lambda \sim 0,505$ мкм). Визначені властивості можуть бути використані у різного типу сенсорах, зокрема при реєстрації зміни температури.

Врахування перепоглинання фотонів у випромінювальній рекомбінації в GaAs сонячних елементах

I. O. Соколовський¹, А. В. Саченко¹, В. П. Костильов¹, А. Й. Шкrebтій²

¹Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова, НАНУ, просп. Науки 41, Київ-03028, Україна e-mail: I.O.Sokolovskyi@gmail.com

²Faculty of Science, Ontario Tech University, 2000 Simcoe Street North, Oshawa, Ontario L1G 0C5, Canada

Послідовна модель випромінювальної рекомбінації в GaAs побудована в роботі Джонсона та ін. [1] Не враховуючи ефект перевипромінювання, автори визначили залежність параметру випромінювальної рекомбінації від температури, як

$$B(T) = B_0 \left[\left(\frac{T_b}{T} \right)^2 - 1 \right].$$

Характеристична температура T_b при цьому дорівнює 951,2 К, а $B_0 = 7,076 \cdot 10^{-11}$ см³/с. Для температури в 298,15 К розрахунок дає $6,495 \cdot 10^{-10}$ см³/с. В цій же роботі представлено актуальні параметри матеріалу.

Слід зазначити, що GaAs – матеріал прямо зонний і має високий коефіцієнт поглинання, що залежить від типу та рівня легування. Цей чинник також зумовлює суттєве перепоглинання випромінених фотонів.

Звуження зон в залежності від рівня легування та концентрації нерівноважних носіїв в GaAs розглянуте в роботі Хармона та ін. [2] Узгоджуючи експериментальні дані, автори отримали для звуження зон формулу

$$\Delta E_g = A \cdot N^{1/3} + kT \ln \left[\Phi_{1/2} \left(\frac{E_f}{kT} \right) \right] - E_f,$$

де A дорівнює $3,23 \cdot 10^{-8}$ еВ·см для n-типу та $2,55 \cdot 10^{-8}$ еВ·см для p-типу, E_f – енергія Фермі, що відраховується, відповідно, від краю зони провідності або валентної зони. На рисунку 1 наведено залежності звуження зон від рівнів легування при застосуванні цієї та спрощеної формул. Точками наведено скореговані експериментальні дані з роботи Хармона та ін.

Для врахування перепоглинання фотонів, що були випромінені застосуємо підхід з нашої роботи [3], де розглядалися параметри Si. Чинник перепоглинання або утилізації фотонів з врахуванням ефективного шляху фотонів можна записати, як

$$PRR = \frac{\int_0^{\infty} \frac{\alpha_{bb}(E_{ph})}{\alpha_{bb}(E_{ph}) + 1/l_{ph}(E_{ph})} \left(\frac{n_r(E_{ph})E_{ph}}{\pi c \eta^{3/2} n_i(T)} \right)^2 \exp\left(-\frac{E_{ph}}{kT}\right) dE_{ph}}{\int_0^{\infty} \alpha_{bb}(E_{ph}) \left(\frac{n_r(E_{ph})E_{ph}}{\pi c \eta^{3/2} n_i(T)} \right)^2 \exp\left(-\frac{E_{ph}}{kT}\right) dE_{ph}}.$$

α_{bb} тут – міжзонне поглинання, n_r – показник заломлення, n_i – власна концентрація носіїв заряду, E_{ph} – енергія фотона, l_{ph} – ефективний оптичний шлях фотона. Згідно з модифікованою формулою Яблоновича для текстурованого сонячного елементу

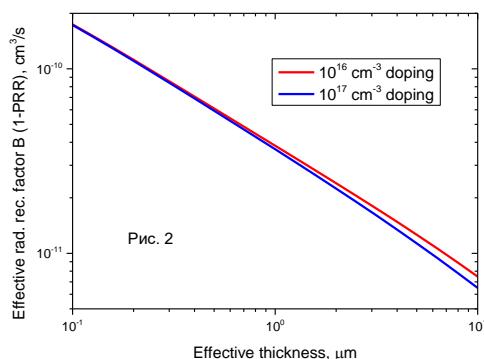
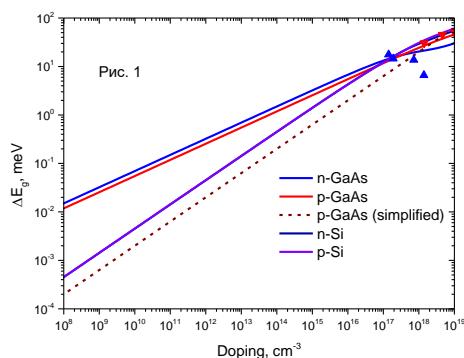
$$l_{ph}(E_{ph}) = 4wn_r(E_{ph})^2/b$$

Тут w – товщина зразка, а b – чинник оптичної неідеальності. Ефективна оптична товщина, відповідно, складає w/b .

Ефективний параметр випромінювальної рекомбінації, таким чином, можна записати, як

$$B_{eff} = B(T)[1 - PRR]$$

На рисунку 2 наведено відповідні залежності для ефективного параметра випромінювальної рекомбінації.



Таким чином, встановлено, що ефект перепоглинання має суттєвий вплив на ефективну швидкість випромінювальної рекомбінації в GaAs і потребує врахування при моделюванні сонячних елементів.

Література

1. Excitation dependent photoluminescence measurements of the nonradiative lifetime and quantum efficiency in GaAs, S. R. Johnson, D. Ding, J.-B. Wang,

S.-Q. Yu, and Y.-H. Zhang, Journal of Vacuum Science & Technology B 25, 1077 (2007)

2. Harmon, E. S.; Melloch, Michael R.; and Lundstrom, Mark S., "Effective Bandgap Shrinkage in GaAs" (1994). Department of Electrical and Computer Engineering Faculty Publications. Paper 101

3. V. P. Kostylyov, A. V. Sachenko, M. Evstigneev, I. O. Sokolovskyi, A. I. Shkrebtii; Characterization and optimization of high-efficiency crystalline silicon solar cells: Impact of recombination in the space charge region and trap-assisted Auger exciton recombination. *J. Appl. Phys.* 14 January 2025; 137 (2): 023101. <https://doi.org/10.1063/5.0239369>

Високоякісне енергетичне забезпечення критичних технологій

Володимир Яськів¹, Анна Яськів², Валерій Лазарюк³

^{1,3} Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

56, вул.Руська, Терноаіль, 46001. Україна

² Економічний університет у Вроцлаві,
бул. Командорська, 118/120, Вроцлав, 53-345, Польща,

Відомо, що характеристики первинних перетворювачів (сенсорів) є визначальними в роботі сучасних радіоелектронних систем (РЕС). Саме від них залежать такі параметри систем як стабільність вихідних параметрів, їх точність, інформативність тощо. Однак часто перфектних характеристик сенсорів є недостатньо для забезпечення заданих параметрів систем. Крім систем керування, які визначають режими роботи РЕС і в яких використовуються відповідні сенсори, в значній мірі ці режими роботи ще будуть залежати і від характеристик відповідного енергетичного забезпечення РЕС. Функції погодження та перетворення параметрів електричної енергії виконують напівпровідникові перетворювачі електроенергії (НПЕ). Саме критичні технології вимагають енергетичного забезпечення з жорстким набором експлуатаційних характеристик - забезпеченням функціональних параметрів в широкому діапазоні зміни всіх збурюючих факторів, високою якістю вихідних напруг, високим ККД, низьким рівнем електромагнітних завад, високим рівнем струму навантаження та 100% діапазоном його зміни, високим рівнем динамічних характеристик, питомої потужності, надійності, радіаційної та механічної стійкості, низькою собівартістю та високим рівнем їх уніфікації задля мінімізації матеріальних, фінансових та інтелектуальних затрат на етапі як розробки високочастотних НПЕ, так і їх виробництва. Існуючі підходи до побудови сучасних НПЕ не дозволяють в повній мірі реалізувати такий набір характеристик.

З появою високочастотних магнітних матеріалів з прямокутною петлею гістерезису (ППГ) набуває подальшого розвитку техніка магнітного перетворення параметрів електроенергії. Сучасні магнітом'які аморфні сплави характеризуються високим коефіцієнтом прямокутності, малою напруженістю поля повного перемагнічування, високим рівнем індукції насищення. Завдяки високому рівню радіаційної та механічної стійкості, надійності, ефективності, електромагнітної сумісності, а також простоті реалізації схемних рішень вони використовуються в ролі осердь високочастотних магнітних підсилювачів (ВМП), які виконують функції силових ключів в регуляторах та стабілізаторах постійної напруги.

Такі переваги НПЕ на ВМП як низький рівень електромагнітних завад, висока якість вихідних напруг, простота схемотехнічних рішень, високий рівень надійності та радіаційної стійкості, ефективності, можливість реалізації багатоканальних джерел живлення з рівноцінними та незалежними вихідними каналами, а також простота реалізації керованих НПЕ у функції будь-яких параметрів чи за заданим алгоритмом, обумовлюють їх використання для живлення радіопередавальних та приймальних пристройів систем зв'язку, бортової та наземної апаратури космічного призначення, засобів інформаційних технологій, в атомній енергетиці, медичній техніці, електрозварюванні тощо.

Визначальною особливістю роботи ВМП є наявність високочастотної вхідної змінної напруги. Саме це, а також некритичність його до форми цієї напруги, робить перспективним використання регуляторів на основі ВМП в сучасних системах безпровідної передачі електроенергії.

"Гібридні фото- та термоелектричні перетворювачі енергії: перспективи підвищення ефективності сонячних систем"

Яворська Л.О., Никируй Л.І., Яворський Р.С.,
Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна.
e-mail: lilia.katanova@rnu.edu.ua

Сучасні тенденції розвитку відновлюваних джерел енергії мають визначальне значення для досягнення сталого енергозабезпечення та мінімізації екологічного навантаження. Проте сонячні панелі, виготовлені на основі одного типу напівпровідникового матеріалу, здатні поглинати лише обмежену частину спектра сонячного випромінювання, що істотно обмежує їхню загальну ефективність [1].

Температура робочої поверхні фотоелектричних модулів істотно впливає на їх ефективність. Зростання температури спричиняє зниження напруги холостого ходу, зменшення ширини забороненої зони напівпровідника, а також збільшення рекомбінаційних втрат, що в комплексі призводить до зниження вихідної потужності системи. Крім того, підвищенні температури прискорюють процеси деградації матеріалів, з яких виготовлені сонячні панелі, що негативно позначається на їхньому експлуатаційному ресурсі [2].

У зв'язку з цим одним із пріоритетних напрямів удосконалення технологій сонячної енергетики є розробка ефективних методів охолодження фотоелектричних елементів. Перспективним підходом до вирішення цієї задачі є впровадження гібридних фотоелектрично-термоелектричних (PV-ТЕ) систем. Такі системи не лише сприяють зниженню робочої температури фотоелементів, але й дозволяють додатково генерувати електроенергію завдяки ефекту Зеебека, що забезпечує перетворення температурного градієнта у різницю електричних потенціалів [3]. Термоелектричні генератори (ТЕГ) ефективно функціонують у високотемпературних умовах, використовуючи надлишкове тепло, яке утворюється в процесі поглинання сонячного випромінювання.

Гібридні PV-ТЕ системи зазвичай включають фотоелектричні модулі, термоелектричні генератори та проміжний теплопровідний шар, який забезпечує ефективну теплопередачу між окремими компонентами системи [4]. На рисунку 1 представлено схематичне зображення PV-ТЕ системи. Стандартний термоелектричний (ТЕ) модуль складається з керамічної основи, електродів і термоелектричних ніжок. У даній конфігурації застосовано принцип теплової концентрації, що передбачає меншу площину ТЕ-модуля порівняно з площею PV-модуля. Таке конструктивне рішення дозволяє зменшити загальну вартість системи за

рахунок скорочення об'єму термоелектричних матеріалів. Для реалізації теплової концентрації в традиційній PV-ТЕ системі використовується мідна пластина, яка забезпечує рівномірний розподіл температури по поверхні фотоелектричного елемента. Сонячна енергія, поглинена фотоелементом, частково перетворюється на електричну енергію, а надлишкове тепло передається до ТЕ-модуля для додаткової генерації електроенергії.

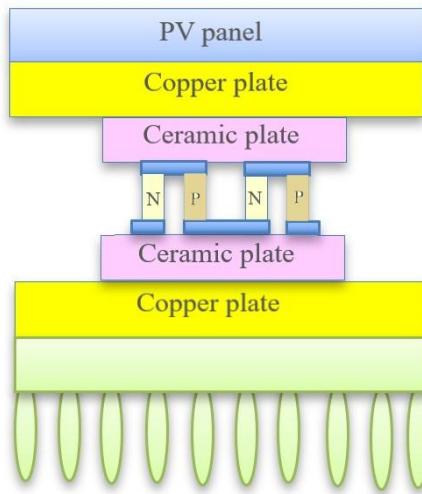


Рис. 1. Схематична будова фото-термоелектричної системи

Використання подібних конструкцій дозволяє підвищити загальний коефіцієнт корисної дії (ККД) на 5–15%, залежно від експлуатаційних умов і властивостей застосованих матеріалів [5]. Крім того, результати досліджень свідчать про те, що інтеграція термоелектричних елементів у PV-системи сприяє збільшенню тривалості експлуатації фотоелектричних модулів завдяки стабілізації їхньої робочої температури.

Література:

- [1] LV, Song, et al. “Comparative analysis of photovoltaic thermoelectric systems using different photovoltaic cells. Applied Thermal Engineering.” 2023.
- [2] Bulat, S. et al. “Efficiency Enhancement in Photovoltaic–Thermoelectric Hybrid Systems through Cooling Strategies. Energies.” 2024.
- [3] Freunek, M. et al. “A thermodynamic and economic analysis of PVT and PV+TEG hybrid systems.” Renewable Energy, 2013.
- [4] Meng, F. et al. “Optimization and analysis of a hybrid photovoltaic-thermoelectric system.” Energy Conversion and Management, 2014.
- [5] Seetawan, T. et al. “Thermoelectric power generation and applications.” Journal of Physics: Conference Series, 2016.

IR and THz broadband sensitive structure based on nanocomposite p-Si/SiO_x(Si)&Al_yO_z(Al) films

V. Zabudsky, O. Bratus, O. Golenkov, N. Kukhtaruk, I. Lysiuk, Ye. Melezhyk, A. Shekera, F. Sizov, K. Svezhentsova, Z. Tsybrii, M. Vuichyk, A. Yevmenova
V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, Nat. Acad. of Sci. of Ukraine
41, Nauky Ave., Kyiv 03028, Ukraine

Development of high-performance broadband infrared/terahertz (IR/THz) photodetectors is one of the challenges in optoelectronics. Photodetectors operating across broad region from infrared to terahertz provide valuable information from both spectral segments, thus widening their applications. Many materials have been shown suitable for detecting radiation in both, IR and THz regions [1], but achieving higher performance, lower costs as well as miniaturization and integration with complementary technologies remains a persistent challenge. In this work we report detection of IR and THz radiation with nanocomposite p-Si/SiO_x(Si)&Al_yO_z(Al) films integrated with metal antennas.

Nanocomposite films SiO_x(Si)&Al_yO_z(Al) were obtained by sputtering a combined target (Al/Si) in an Ar/O₂ atmosphere using the ion-plasma sputtering (IPS) method. The deposition process parameters were: chamber pressure $P = 6.0 \times 10^{-4}$ Torr ($P = 7.9 \times 10^{-2}$ Pa), substrate temperature $T = 100\text{--}120$ °C, cathode heating current $I_K = 150$ A, anode voltage $V_A = 50$ V, anode current $I_a = 10$ A, target voltage $V_m = 0.7$ kV, target current $I_m = 0.6$ mA. The working gas ratio in the chamber during deposition was O₂/Ar = 5/55 = 0.09. High-temperature annealing of the initial film p-Si/SiO_x(Si)&Al_yO_z(Al) was carried out in an Ar atmosphere for 30 minutes at $T = 700$ °C.

Sensitive layers SiO_x(Si)&Al_yO_z(Al) were integrated with metallic bow-tie antennas by thermal aluminium deposition (1 μm thick) and by using photolithographic processes and chemical treatments. The area of nanocomposite film had dimensions of 50×10 μm², and the size of the metal planar antenna was optimized for the radiation frequency range of 140 - 300 GHz. Using wire cutting the structure was divided into individual sensitive elements with contacts formed by bonding. The final sample contained eight sensitive elements for subsequent studies of photosensitivity and electrophysical characteristics.

The optical, electrical, and morphological properties of nanocomposite SiO_x(Si)&Al_yO_z(Al) films were measured using Fourier-transform infrared spectroscopy, the Hall effect, and atomic force microscopy (AFM). IV characteristics shows the linear dependence with resistance of samples several kiloohm order. The measured carrier concentration at temperature $T = 300$ K was $N = 9.5 \times 10^{18}$ cm⁻³ and the mobility was $\mu = 118$ cm²/V·s. The surface morphology features of the SiO_x(Si)&Al_yO_z(Al) nanocomposite films were investigated using contact-mode atomic force microscopy (Fig. 1). It was shown that the samples exhibit a well-developed surface morphology, with structural elements of three types observed, having grain sizes of 5–10 nm,

150–200 nm, and 700–1000 nm. The distribution of larger structural elements across the film surface is non-uniform. The surface roughness parameters are $R_a = 20$ – 30 nm and $R_q = 30$ – 40 nm for regions with different morphologies.

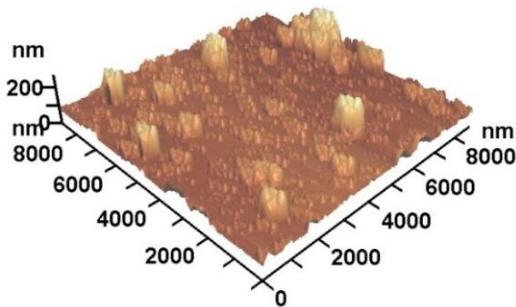


Fig. 1. 3D AFM image of the surface of $\text{SiO}_x(\text{Si})\&\text{Al}_y\text{O}_z(\text{Al})$ film.

data are given for mercury-cadmium-telluride (MCT) and pyroelectric detectors. Measured signal to noise ratio for $\text{SiO}_x(\text{Si})\&\text{Al}_y\text{O}_z(\text{Al})$ nanocomposite films was near 150.

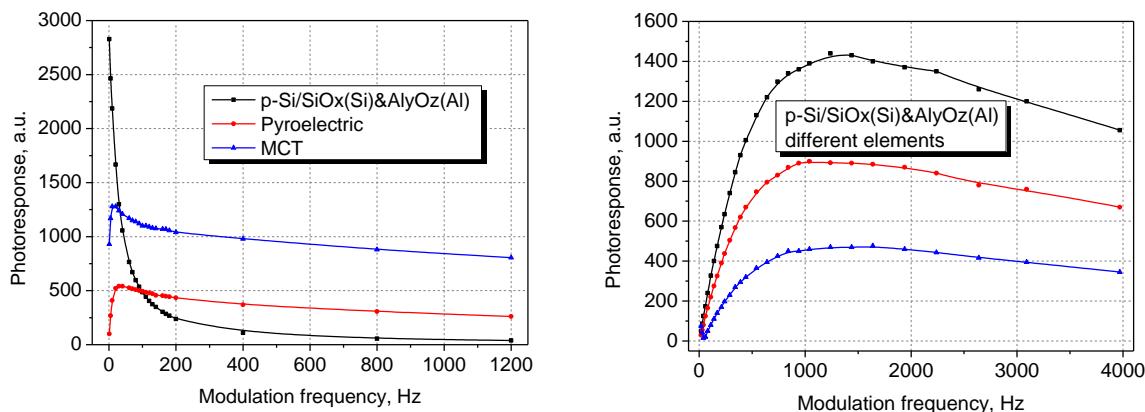


Fig. 2. Dependence of detector response from modulation frequency for 140 GHz (left) and IR (right) radiation.

The developed nanocomposite p-Si/SiO_x(Si)&Al_yO_z(Al) structures integrated with metal antennas demonstrate broadband sensitivity to both infrared and terahertz radiation, offering a promising platform for multifunctional photodetection. Their signal-to-noise ratio, combined with compatibility for miniaturization and integration, highlights their potential for advanced optoelectronic applications.

1. T. Araki, K. Li, D. Suzuki, T. Abe, R. Kawabata, T. Uemura, S. Izumi, S. Tsuruta, N. Terasaki, Y. Kawano, T. Sekitani, Broadband Photodetectors and Imagers in Stretchable Electronics Packaging. *Adv. Mater.* 2024, 36, 2304048. <https://doi.org/10.1002/adma.202304048>

Особливості моделювання текстурованих кремнієвих сонячних елементів з тиловим розміщенням колекторного *p-n* переходу

**В.М. Власюк¹, А.В. Саченко¹, В.П. Костильов¹, Р.М. Коркішко¹, І.О. Соколовський¹,
В.В. Черненко¹**

¹*Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України,
пр. Науки 41, м. Київ, 03680, Україна*

Розвиток технологій, що дозволяють отримати високоякісний кремній з великими значеннями часу життя неосновних носіїв заряду і разом з тим стрімке наближення ефективності фотоперетворення одноперехідних сонячних елементів (СЕ) до їх граничної ефективності [1] сприяли появи СЕ з тиловим розміщенням колекторного *p-n* переходу (рис. 1). Така конструкція дозволяє позбутися електричних контактів на фронтальній поверхні фотоперетворювача і збільшити за рахунок цього фотоактивну площа СЕ без збільшення його геометричних розмірів, що позитивно впливає на ККД фотоперетворення.

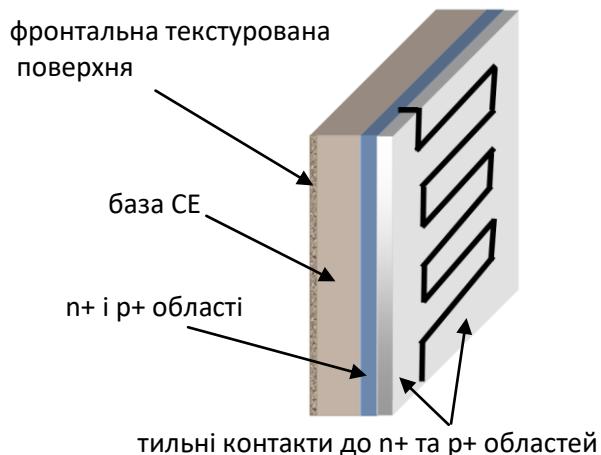


Рис.1. Схематичне зображення кремнієвого СЕ з тиловим розміщенням колекторного *p-n* переходу [2].

В цій роботі запропоновано теоретичну модель для розрахунку ключових параметрів кремнієвих СЕ з тиловим розміщенням колекторного *p-n* переходу, такі як струм короткого замикання, напруга розімкненого кола та ефективність фотоперетворення. Запропонована модель додатково враховує такі рекомбінаційні механізми як безвипромінювальна рекомбінацію екситонів за механізмом Оже за участю глибокого рекомбінаційного рівня та рекомбінацію в області просторового заряду (ОПЗ). Встановлено, що врахування цих рекомбінаційних механізмів важливе для моделювання характеристик типових комерційних СЕ з тиловим розміщенням колекторного *p-n* переходу, що працюють в режимі максимальної потужності. Вираз для

ефективного часу життя неосновних носіїв в кремнії τ_{eff} з врахуванням всіх механізмів рекомбінації може бути записаний як:

$$\tau_{eff}(n) = \left[\frac{1}{\tau_{SRH}(n)} + \frac{1}{\tau_{nr}(n)} + \frac{S_s}{d} \left(1 + \frac{\Delta n}{n_0} \right) + \frac{1}{\tau_r(n)} + \frac{1}{\tau_{Auger}(n)} + \frac{A_B}{A_{SC}} \frac{S_{SC}(n)}{d} \right]^{-1}, \quad (1)$$

де $n = n_0 + \Delta n$, n_0 – рівноважна концентрація основних носіїв заряду, Δn – концентрація надлишкових носіїв заряду, τ_{SRH} – час життя Шоклі-Ріда-Холла, τ_{nr} – час безвипромінювальної екситонної рекомбінації за механізмом Оже з участю глибокого домішкового рівня, τ_r – час випромінювальної рекомбінації, τ_{Auger} – час міжзонної рекомбінації Оже, S_s – сумарна величина швидкостей поверхневої рекомбінації на фронтальній та тиловій поверхнях, S_{SC} – швидкість рекомбінації в області просторового заряду, A_{SC} – площа СЕ, A_B – сумарна площа областей де створено інверсійні вигини зон.

Запропонована модель справедлива при виконанні наступних критеріїв: 1) довжина дифузії неосновних носіїв заряду L_d суттєво перевищує товщину d ; 2) швидкість поверхневої рекомбінації S достатньо мала, так що виконується нерівність $S \ll D_A/d$, де D_A – амбіполярний коефіцієнт дифузії. Слід відзначити, що в СЕ з тиловим розміщенням колекторного $p-n$ переходу, на відміну від СЕ класичної конструкції більш суттєву роль відіграє поверхнева рекомбінація на фронтальній поверхні S_0 і критерій $S_0 \ll D_A/d$ може не виконуватися.

Запропонований підхід дозволяє проводити оптимізацію основних параметрів СЕ, таких як товщина базової області, рівень легування та ін.

Верифікацію запропонованої моделі проведено шляхом співставлення результатів моделювання з експериментальними даними отриманими на СЕ з тиловим розміщенням колекторного $p-n$ переходу торгової марки «SunPower», які на сьогоднішній день мають одні з найвищих показників ефективності фотоперетворення серед промислових СЕ. Показано, що запропонований підхід дозволяє кількісно узгодити розраховані параметри текстурованих кремнієвих СЕ з експериментальними.

Використані джерела

1. V.P. Kostylov, A.V. Sachenko, Semiconductor photovoltaics: Current state and actual directions of research. Optoelectronics and Semiconductor Technique. 53 pp. 13-37 (2018).
2. V.P. Kostylyov, A.V. Sachenko, O.A. Serba et al. Influence of nanostructured ITO films on surface recombination processes in silicon solar cell. Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. 18 (4) pp. 464-467 (2015).

Створення зустрічно-штирьових контактів за допомогою інтерференційної фотолітографії

Данько В.А., Минько В.І., Беляєв О.Є., Індутний І.З., Мамікін С.В.

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України,

03028, Київ - 28, пр.Науки, 41, Україна

Зустрічно-штирьові контакти (ЗШК) - це структура, що складається з двох систем металічних смужок, періодично розташованих на плоскій поверхні. Кожна система має окремий електрод, який з'єднує смужки тільки з одного краю, тобто металічний (електричний) контакт між системами відсутній. ЗШК використовуються в різних галузях науки та техніки, включаючи такі як електроніка, комп'ютерна техніка, телекомунікації і т.п. Зокрема, в сонячній енергетиці зараз дуже широко досліджується технологія «Interdigitated Back Contact cells», тобто технологія при якій сонячна комірка не має переднього електричного контакту, а задній її контакт виконано в формі зустрічно -штирьового. Прикладом застосування ЗШК є також малоінерційні детектори інфрачервоного випромінювання. Виготовляти ЗШК можна різними методами, як то штампування, лазерна різка, плавлення, лиття і т.д. Якщо ж говорити про високочастотні ЗШК з субмікронними ширинами металічних смужок, то коло технологій їх виготовлення звужується і на перший план виходять літографічні методи.

Попередні дослідження авторів показали, що системи планарних металічних структур з технологічно заданими міжелементними проміжками, що можуть складати величину до 100 нм, можна отримати методом інтерференційної фотолітографії з використанням неорганічних халькогенідних фоторезистів. Один з варіантів методу отримання планарних металічних структур за допомогою двохшарового резисту (два тонкоплівкові халькогенідні резисти, один з яких фоточутливий) забезпечував виготовлення хромової планарної структури металічних смужок [1].

В даній роботі представлено новий технологічний процес, який дозволяє створити ЗШК з субмікронними штирьовими елементами за допомогою інтерференційної літографії та деяких додаткових технологічних операцій. В якості підкладинок для формування ЗШК використовувались поліровані скляні, або ж кремнієві пластини на які методом термічного осадження у вакуумі $2,5 \cdot 10^{-3}$ Па послідовно наносились: шар металу (хром, алюміній, або золото) товщиною ~ 30 - 50 нм, та двохшаровий халькогенідний фоторезист ($As_4S_{66}Ge_{30}$ товщиною 80 нм та $As_{40}S_{30}Se_{30}$ товщиною 100 нм). Після цього пластину розміщували в оптичній схемі для запису інтерференційного світлового поля та здійснюють експонування, використовуючи випромінювання гелій-кадмієвого лазера на довжині хвилі 441,6 нм. Експонування здійснювали на віброзахищеному лазерному стенді, величина експозиції становила $0,4$ Дж/см 2 . Період

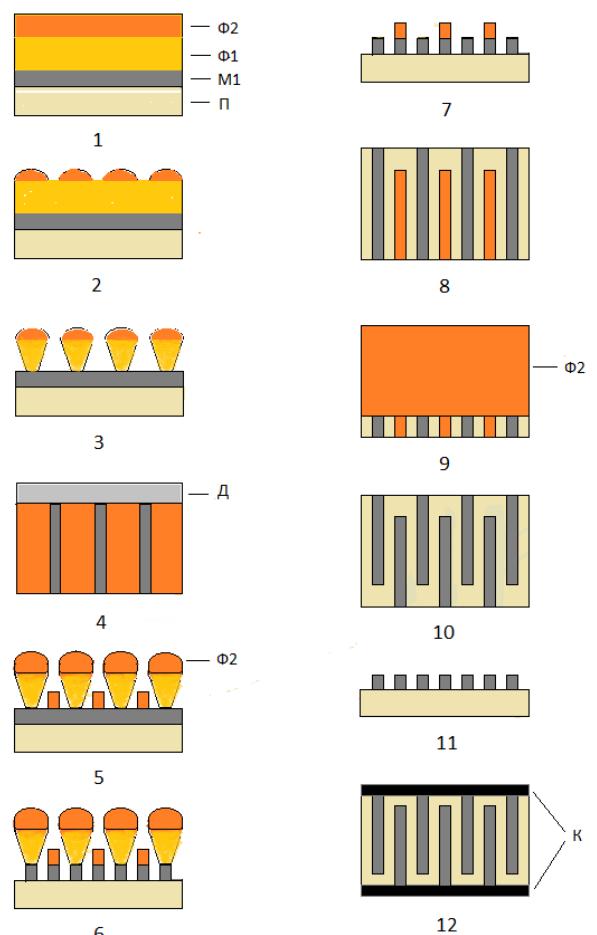
інтерференційної картини визначався величиною кута між двома когерентними пучками лазерного випромінювання, які падали на пластину з нанесеною багатошаровою структурою.

Наступні технологічні операції забезпечували формування періодичної структури металевих смужок подвоєної частоти порівняно з просторовою частотою інтерференційного світлового поля, аналогічно технологічному процесу, описаному в роботі [1]. Але в даній роботі були введені додаткові операції – нанесення додаткового шару фоторезисту та почергове екронування країв металевих смужок при такому нанесенні. Це дозволило сформувати контакти до двох систем металевих смужок та отримати ЗШК заданої просторової частоти (рис. 1).

Рис. 1. Схема технологічних операцій при формуванні ЗШК. П – підкладинка, М1-метал, Ф1-фоторезист $As_4S_{66}Ge_{30}$, Ф2-фоторезист $As_{40}S_{30}Se_{30}$, Д – діафрагма, К – контакти, 1 – осадження металу та фоторезисту, 2 – формування літографічної маски в шарі Ф2, 3- часткове травлення шару Ф1, 4, 5 - екронування краю зразка діафрагмою Д та нанесення Ф2, 6 - видалення відкритих ділянок шару металу М1, 7, 8 - травлення шару Ф1(підривна літографія), 9 – екронування протилежного краю зразка діафрагмою Д та нанесення Ф2, 10, 11 - видалення Ф2, 12 - екронування структури діафрагмою, за винятком країв, та нанесення контактів із срібно-марганцевого сплаву (К).

В результаті вдалося розробити достатньо просту і дешеву технологію формування високочастотних (просторовий період від 200 до 1000 нм) ЗШК з скважністю від 30 до 70%. Деяка модифікація проілюстрованого рис. 1 технологічного маршруту дозволяє також сформувати ЗШК, в якому дві системи штирів виготовлені з різних металів. Окрім того була продемонстрована можливість оперативно змінювати морфологічні параметри структури (розміри та частоту елементів) даних ЗШК в субмікронному інтервалі, а, відповідно, і їх функціональні частоти.

[1]. I. Z. Indutnyi, V. A. Dan'ko, V. I. Min'ko, P. E. Shepelyavyi, O. V. Berezn'ova, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, Vol.13,No 11-12, P. 1467 -1469.



Вплив асоціації-дисоціації пар FeB на світлові вольтамперні характеристики кремнієвих сонячних елементів

**Р.М. Коркішко¹, В.М. Власюк¹, В.П. Костильов¹,
О.Я. Оліх², В.В. Черненко¹**

¹ Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України,
03680, проспект Науки 41, Київ, Україна, e-mail: romkin.ua@gmail.com

² Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
03187, проспект Академіка Глушкова, 4г, Київ, Україна, e-mail: olikh@univ.kiev.ua

Присутність атомів забруднюючих домішок, зокрема заліза, шкідливо позначається на ефективності фотоперетворення кремнієвих сонячних елементів (СЕ) та зібраних з них сонячних модулів (СМ), через зменшення часу життя та дифузійної довжини надлишкових носіїв заряду. Поглиблена розуміння поведінки цих домішок для покращення експлуатаційних характеристик кремнієвих СЕ є актуальною задачею.

Відомо, що Fe у кремнії може перебувати у двох станах: у вигляді пари FeB, та у міжвузельному стані Fe_i. Fe_i з його порівняно глибоким енергетичним рівнем є більш ефективним рекомбінаційним центром, ніж FeB з енергетичним рівнем, близьким до краю валентної зони. Розпад пар FeB може бути обумовлений дією зовнішніх факторів: температури, світлового опромінення з енергією квантів, більшою за ширину забороненої зони кремнію і та ін. Дослідження кінетики зміни фотоелектричних параметрів СЕ внаслідок дисоціації пар FeB проводилося на зразках СЕ дифузійно-польового типу з геометричними розмірами 1,52×1,535 см (площа 2,33 см²), що мають структуру n⁺-p-p⁺ та виготовлені на основі монокристалічних пластин p-типу кремнію марки КДБ-10 з питомим опором 10 Ом·см (рівень легування ~1,4·10¹⁵ см⁻³). На фронтальній поверхні СЕ мали просвітлюючі покриття з двоокису кремнію SiO₂ товщиною 30 нм і нітриду кремнію Si₃N₄ товщиною 40 нм. На рис. 1 представлена світлова ВАХ, отримана на вихідному зразку СЕ (суцільна лінія), а потім після термообробки при температурі 210°C (лінія пунктиром). Визначені з світлової ВАХ фотоелектричні параметри приведені в таблиці 1. Як можна бачити з рис. 1 та таблиці 1 – комбінована обробка світлом і температурою зразка призводить до зменшення струму короткого замикання в порівнянні з його величиною на вихідному зразку СЕ без обробок. Оскільки в цьому випадку час життя, пов'язаний з рекомбінаційним центром Fe_iB, більший ніж час життя, обумовлений рекомбінаційним центром Fe_i в міжвузлі, а сама залежність часу життя від рівня збудження для рекомбінаційного центру FeB є слабко вираженою на відміну від залежності для рекомбінаційного центру Fe_i в міжвузлі, яка є досить стрімкою. Тому, оскільки до обробки світлом і термообробки в кремнії

переважають рекомбінаційні центри FeB, а ці обробки призводять до руйнування зв'язків FeB і формування Fe_i в міжвузлі, то це призводить до зменшення ефективного часу життя нерівноважних носіїв заряду, і як наслідок, до зменшення величини струму короткого замикання в порівнянні з її величиною на вихідних зразках. Відносно різниці в зміні струму короткого замикання I_{sc} на вимірюваній світловій ВАХ зразка кремнієвого СЕ після обробки світлом і температурою (рис. 1), то це може бути пов'язано з тим, що обробка світлом протягом 8 хв не призвела до розпаду всіх наявних пар FeB, а температурна обробка 3 хв призвела до розпаду додаткових FeB. Варто зазначити, що вимірювання світлових ВАХ на досліджуваному зразку до, та після обробок проводилося при однакових рівнях енергетичної освітленості, однак рівень збудження при цьому може бути різним, оскільки він залежить не лише від темпу генерації електронно діркових пар (визначається рівнем енергетичної освітленості), а і від їх ефективного часу життя який змінюється як в залежності від зразка, так і в результаті температурних обробок. Після проходження 24 годин з моменту кінцевої обробки, спостерігалося відновлення параметрів кремнієвого СЕ до початкових значень.

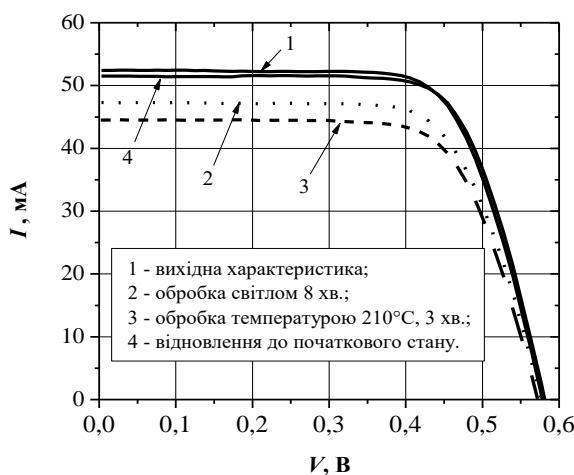


Рис. 1. Світлові ВАХ СЕ (a) на вихідному зразку (суцільна лінія), після обробки світлом ($1000 \text{ Вт}/\text{м}^2$) 8 хв (лінія крапками) та після термообробки 210°C , 3 хв (лінія пунктиром), відновлення до початкового стану, (суцільна лінія).

Таблиця 1. Визначені з світлових ВАХ фотоенергетичні параметри зразка кремнієвого СЕ.

Обробка	I_{sc} , mA	V_{oc} , V	P , мВт/см ²	I_m , mA	V_m , V	FF , %	T , °C	E_{ff} , %
вихідний	52,407	0,578	100	48,42	0,443	70,726	25	5,06
світлом	47,303	0,576	100	44,339	0,43	69,945	25	4,33
температурою	44,506	0,572	100	40,777	0,442	70,896	25	4,20
відновлення	51,491	0,581	100	48,519	0,443	71,845	25	5,09

Отримані результати дозволяють застосовувати існуючі методики дослідження вмісту, поведінки і властивостей домішок заліза у кремнієвих пластинах на готових кремнієвих СЕ.

МЕТОД ДІАГНОСТИКИ ПРАЦЕЗДАТНОСТІ СОНЯЧНИХ БАТАРЕЙ.

Мазурік С.В., Коваленко О.В., Кожан О.Є.

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,
пр. Науки, 72, м. Дніпро, 49045, Україна*

У сучасному світі все більше значення приділяється використанню відновлюваних джерел енергії, серед яких сонячні батареї займають важливе місце. Зелена енергетика, отримана від сонячного випромінювання, стала не лише символом екологічної сталості, але й напрямком для забезпечення енергетичної безпеки та вирішення екологічних проблем. Перетворюючи сонячне випромінювання в електричну енергію, сонячні батареї мають низку переваг. По-перше, це екологічно чистий спосіб генерації енергії, оскільки він не супроводжується викидами та іншими шкідливими впливами на навколишнє середовище. По-друге, сонячні батареї забезпечують стабільне та невичерпне джерело енергії, оскільки сонячне випромінювання є постійним та доступним ресурсом. Це особливо важливо в умовах зростаючого попиту на електроенергію та обмежених запасів традиційних енергетичних ресурсів.

Зважаючи на переваги сонячних батарей розробка та вдосконалення методів діагностики і виявлення пошкоджень у сонячних батареях стає надзвичайно важливим завданням для підтримання їхньої ефективності та тривалого функціонування.

Методи діагностики дозволяють виявити пошкодження сонячних елементів як перед експлуатацією, так і під час роботи сонячних батарей. Дослідження та аналіз дефектів сонячних батарей виконуються з метою попередження їхньої деградації, перегріву та інших негативних явищ. Існують різні способи пошуку пошкоджень сонячних батарей. Такі як, обстеження сонячних батарей методом інфрачервоного аналізу, методом електролюмісцентного тестування, обстеження сонячних батарей шляхом вимірювання вольт-амперних, люкс-амперних та спектральних характеристик.

У роботі проведено дослідження основних параметрів та характеристик сонячних батарей при імітації технічних пошкоджень. Метод імітації пошкоджень – це метод діагностування, за яким штучно створюють "пошкодження" сонячної батареї, тобто робиться штучне нагрівання, затемнення, короткі замикання, пошкодження електричних мереж живлення, зміни опору, втрати контактів, тощо. Ці умови імітують аномалії, які можуть виникнути в сонячних батареях під час їхньої експлуатації. Даний підхід дозволяє досліджувати ефективність, надійність сонячних батарей в умовах різноманітних пошкоджень, виявляти конструктивні недоліки.

Для експериментального дослідження основних параметрів сонячних батарей при імітації пошкодження було розглянуто два типи основних відокремлених пошкоджень: часткове затемнення поверхні і загальна інтенсивність освітлення. Відповідно до цього було імітовано окремо затемнення певної частки площини сонячної батареї та окремо зміну інтенсивності загального освітлення по всій площині.

Під час експериментального дослідження використовувалась експериментальна сонячна батарея UKC SunPower 20 Вт з 36 послідовно з'єднаних елементів та зібрана діагностуюча установка, яка керувалася мікропроцесором Arduino UNO за допомогою інтерфейсу I²C для отримання цифрової інформації вимірюваних фотоелектричних параметрів сонячної батареї. Розроблена та виготовлена установка складалася з трьох частин. Перша частина створена для регулювання потужності галогенної лампи, з повною потужністю 1000 Вт, яка використовувалась для освітлення сонячної батареї. Друга частина пов'язана з вимірюванням значення освітленості за допомогою датчика - люксметра TSL2561. Третя частина складалася з автоматичного навантаження для сонячної батареї і використовувалася для вимірювання вольт-амперної характеристики сонячної батареї.

При імітації пошкоджень було виміряно дві характеристики: вольт-амперні та люкс-амперні. Вимірювання вольт-амперної характеристики відбувалися за методикою, що базується на прямому вимірюванні енергетичних характеристик сонячної батареї. Вимірювання люкс-амперної характеристики відбувалось за методикою, що базується на вимірюванні значення освітлення з дискретним шагом інтенсивності та вимірюванні відповідного значення фотоструму сонячної батареї. Під час створення штучного затемнення частка закритої площини складала 5,3%, 12,5%, 25% поверхні сонячної батареї. Під час зміни інтенсивності освітлення на галогенну лампу подавали напругу, яка обумовлювала освітлення сонячної батареї пропорційне інтенсивності випромінювання при 200, 400, 600, 800 і 1000 $\frac{\text{Вт}}{\text{м}^2}$.

Розроблена та створена під метод імітації пошкоджень сонячних батарей вимірювальна установка дозволяє скоротити термін дослідження та дає можливість легкого керування системою імітації параметрів пошкоджень. Установка дає можливість тестувати сонячні батареї, виявляти пошкодження, вимірювати характеристики сонячної батареї та зробити оцінку ефективності її роботи.

Моделювання генерації чотирихвильового змішування у WDM-системах з різними інтервалами між оптичними каналами

Попов А.В., Гомоннай О.О., Бабука Т.Я.

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород,
бул. Підгірна, 46, andrii.popov@uzhnu.edu.ua

Програмне забезпечення різних виробників для моделювання процесів стає ключовим інструментом для прогнозування фізичних властивостей, моделювання та аналізу, в тому числі проектування та оцінки ефективності систем оптичного зв'язку. Дослідники застосовували його для різних цілей, включаючи моделювання процесів мультиплексування з поділом довжин хвиль (WDM), зв'язку через видимий діапазон світла (VLC), роботу оптичних підсилювачів та безпеку передачі даних. За допомогою такого програмного забезпечення проведено моделювання характеристик передачі VLC у приміщенні, проаналізовано вплив умов освітлення та чутливості фотодетектора на пропускну здатність системи [1]. Досліджено ефективність підсилювачів з домішками ербію (EDFA) та Рамана в мережі WDM, виявлено перевагу EDFA за показниками якості сигналу та рівнем бітових помилок на великих відстанях [2]. Також проведено оцінки характеристик передачі на різних довжинах хвиль через оптичне волокно довжиною 60–140 км. Симулюючи сигнали на довжинах хвиль 810 нм, 1550 нм та 1625 нм, встановлено оптимальні варіанти за співвідношенням загасання та дисперсії [3].

Оптичне волокно Corning SMF-28R є волокном яке відповідає стандарту G.652.D за класифікацією ITU-T з низькими втратами. Хоча дана модель є одномодовим, і оптимізоване для роботи у вікнах 1310 нм та 1550 нм, які є типовими для WDM-систем але його можна використовувати в системах WDM

Для даної моделі характерне низьке загасання у діапазоні 1550 нм (~0.2 дБ/км), що ідеально підходить для передачі на великі відстані у WDM-системах, низька хроматична дисперсія у діапазоні 1310 нм та помірну дисперсію в області 1550 нм, широка сумісність із більшістю компонентів і обладнання для WDM.

Однак, якщо використовувати SMF-28 у WDM-системі, особливо в DWDM, варто звернути увагу на ефекти вимушеного раманівського розсіювання (SRS) та чвертьхвильове змішування (FWM) при високих рівнях потужності джерел світла та щільному розміщенні каналів.

Для мінімізації таких ефектів в мережах зв'язку може знадобитися компенсація дисперсії залежно від швидкості передачі та довжини лінії

зв'язку. Тому важливо проводити моделювання мереж зв'язку, за результатами яких правильно підбирати відстань між каналами, вирівняти потужність та спланувати оптичні ділянки із повторювачами.

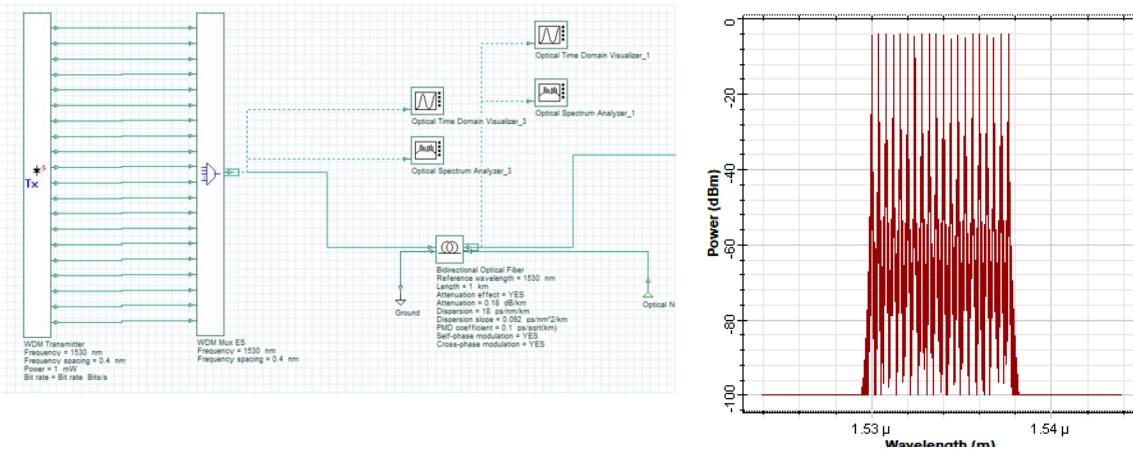


Рис 1. Схематичне зображення мережі передачі та спектр вхідного сигналу у мережі зв'язку з 20 каналами передачі даних в діапазоні 1530- 1538 нм.

Дослідження мережі передачі даних проводилися без врахування нелінійних явищ, так і при наявності ефекту чвертьхвильового змішування (FWM), який вносить негативний вплив на величини BER та значення Q-фактора. Розглянуто методи покращення зазначених параметрів при проектуванні сучасних пасивних оптичних мереж.

Література:

- [1]. Poulose, A. Simulation of an indoor visible light communication system using optisystem. *Signals*. **3**, 765 (2022).
- [2]. T. A. Taha, S. A. Ayoob, and M. T. Yaseen. Raman/EDFA Hybrid System to Enhance the Optical Signal in the Optical Network Journal of Communications. **18**, 621 (2023).
- [3]. Hasan, H. J. Analysis an optical communications system by using Optisystem program to transfer data over various distances. Technium: Romanian Journal of Applied Sciences and Technology. **15**, 75 (2023).

Ohmic and Rectifying Contacts to Narrow-Gap Semiconductors

A.I. Tkachuk¹, V.V. Tetyorkin, A.Z. Yevmenova, K.V. Andrieieva

V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS Ukraine, Kyiv, Ukraine

¹V. Vynnychenko Central Ukrainian State University, Kropyvnytskyi, Ukraine

The scientific interest in contacts on narrow-gap semiconductors is largely due to their unique electronic properties, such as the presence of resonant states that can fix the position of the Fermi level in the conduction or valence bands, high mobility of carriers, a wide range of carrier concentrations in doped materials from $\sim 10^{12}$ cm⁻³ to $\sim 10^{20}$ cm⁻³. The chemical bonding in narrow-gap semiconductors varies from predominantly covalent in InSb to predominantly ionic in PbTe, which allows studying different models of Schottky barrier formation. Narrow-gap semiconductors are mainly used to manufacture infrared devices, but recently significant attention has also been paid to the development of field-effect transistors based on them with a terahertz bandwidth, which requires the formation of low-resistance ohmic contacts.

Various models have been used to explain the properties of contacts in narrow-gap semiconductors, including the effective work function model, the unified defect model (UDF) and the metal-induced gap state (MIGS) model. However, the exact mechanism responsible for the Fermi level pinning at the interface has remained unclear due to a number of physical and chemical processes that lead to the formation of an interfacial layer. Since the fabrication of contacts involves heat treatment/annealing at elevated temperatures, mutual diffusion of metal and semiconductor atoms at the interface can lead to the formation of a shallow *p-n* junction. To make contacts with an abrupt interface, the deposition of multiple layers of metals is usually used. In addition, chemical reactions at the interface form an interfacial layer. Since these reactions cannot be completely suppressed even with a decrease in temperature, the interfacial layer is most likely mainly responsible for the formation of the Schottky barrier in *ex-situ* contacts to narrow-gap semiconductors. The mechanisms of Schottky barrier formation depend on the morphology, chemical composition, and electronic properties of the interfacial layer, as well as on defect states in the semiconductors themselves, which makes experimental studies and understanding their nature difficult. In particular, the oxidation of the surface inevitable occurs in the *ex-situ* fabrication technology used in this study. There is contradictory information about the effect of surface oxidation on the electrical properties of contacts.

The small band gap in narrow-gap semiconductors facilitates the fabrication of ohmic contacts. Traditionally, this has been achieved by doping

the surface layer to increase the tunneling transparency of the Schottky barrier. However, in narrow-gap semiconductors, the pinning of the Fermi level in the conduction or valence bands by resonant states leads to the formation of a layer with a high concentration of charge carriers at the interface, which can be used to fabricate ohmic heterostructure contacts to wide-gap semiconductors.

The mechanisms of Schottky barrier formation in InSb, HgCdTe and PbTe were investigated. Thermal and chemical metal deposition methods, various chemical surface treatment methods and thermal annealing were used to fabricate the contacts. Current-voltage and capacitance-voltage characteristics were measured in the temperature range of 77-300 K. The specific resistance of the contacts was calculated as a function of the barrier height and the doping level. Contacts of two types were fabricated on *n*-InSb single crystals with an electron concentration of 10^{14} - 10^{15} cm⁻³. Contacts of the first type were prepared on an oxidized surface, while for contacts of the second type, the surface oxide was removed by chemical etching followed by hydrogen treatment before metal deposition. Ohmic contacts to the back surface were made by thermal evaporation of In in a vacuum of $\sim 10^{-5}$ Torr and subsequent annealing in an H₂ atmosphere at 170-200 °C for 5-15 min. Rectifying contacts fabricated by electroless deposition of Au at room temperature with subsequent thermal annealing at a temperature of ~ 120 °C in an H₂ atmosphere. A Schottky barrier height of 90-120 meV was found using *C-U* measurements for type I contacts. Barriers of approximately 140 meV height were observed for type II contacts. At small forward and reverse biases $|U|<100$ mV the *I-U* characteristics were linear due an excess current. The excess current has an activation character at temperatures >160 K and shows a tendency to saturation at lower temperatures, indicating its tunneling nature. For forward biases $U>100$ mV, the non-ideality coefficient was 1.5-1.6. Treatment of contacts in a hydrogen atmosphere reduces the excess current as well as the ideality coefficient to values of 1.3-1.4. A possible reason for this is the modification of defect states in the interfacial layer formed by In and Sb oxides. The barrier height which exceeds the band gap was observed in contacts to PbTe. To explain this result, the model of the Fermi level pinning by resonant states is proposed.

Single- and double-layer metal contacts to HgCdTe/CdZnTe layers grown by liquid-phase epitaxy were investigated. Metal contacts (Au(In)/Cr(Mo, Ti)) to the epitaxial films of *n*- and *p*-type conductivity were formed by thermal evaporation in vacuum and magnetron sputtering at room temperature in order to minimize thermal effects on the starting material. The low-temperature technological regimes were found under which ohmic or almost ohmic behavior of the current-voltage characteristics of the contacts was observed for the abrupt metal/HgCdTe/CdZnTe heterointerface at temperatures of 77 and 300 K.

Оптимізація оптоволоконних WDM-систем для мінімізації ефектів вимушеного Раманівського розсіювання світла

Попов А.В.¹, Гомоннай О.О.¹, Попович В.С.²

¹ Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Підгірна, 46,
andrii.popov@uzhnu.edu.ua

² ТОВ «Закарпатполітех», 88000, м. Ужгород, вул. Українська 16

У роботі розглядається проблема виникнення ефектів вимушеного Раманівського розсіювання (SRS) у волоконно-оптичних системах з щільним спектральним мультиплексуванням (WDM) [1]. Метою дослідження є оптимізація таких систем з метою зменшення впливу SRS, що є особливо актуальним для високошвидкісних мереж зв'язку. Моделювання проводилось з використанням параметрів, які відповідають одномодовому волокну Corning SMF-28 та стандарту xPON (ITU-T) [2]. Система включала 20 довжин хвиль. Результати показали значний вплив SRS на ефективність передавання, особливо для каналів із довшими довжинами хвиль. Запропоновано методики оптимізації для зниження рівня міжканальних перешкод, викликаного SRS.

З розвитком оптоволоконних технологій та впровадженням WDM-систем з високою щільністю каналів, особливо в системах типу xPON, актуальним постає питання проявів нелінійних ефектів таких, як чотирихвильове змішування, перехресна фазова модуляція, самомодуляція фази, вимушене Бріллюенівське розсіювання. Допустимі граничні впливи таких ефектів описані в ряді стандартів ITU-T, в тому числі G.652, G.653, G.655, додаток II/G.650.2, додаток II/G.663, додаток III/G.663. Одним із таких ефектів є вимушене Раманівське розсіювання світла (SRS), яке може викликати перекачку енергії між каналами передачі даних та суттєво впливати на якість переданого сигналу. Данна робота присвячена аналізу та мінімізації впливу SRS у 20-канальній WDM-системі за допомогою моделювання.

В якості середовища передачі використовувалися параметри, які відповідають одномодовому волокну Corning SMF-28 довжиною від 100 м до 100 км. Параметри волокна включали стандартне загасання (0.2 дБ/км в діапазоні 1525–1575 нм), дисперсію (18 пс/нм·км) та ефективну площину [3]. Було промодельовано WDM-систему з 20 каналами в діапазоні С-діапазону (1530–1565 нм) зі швидкістю 10 Гбіт/с на канал. Довжини хвиль змінювалися з кроком 0.4 нм. Аналіз впливу SRS проводився шляхом змін потужності лазерів та довжини лінії зв'язку на спектри сигналів та зміни BER (Bit Error Rate) [4].

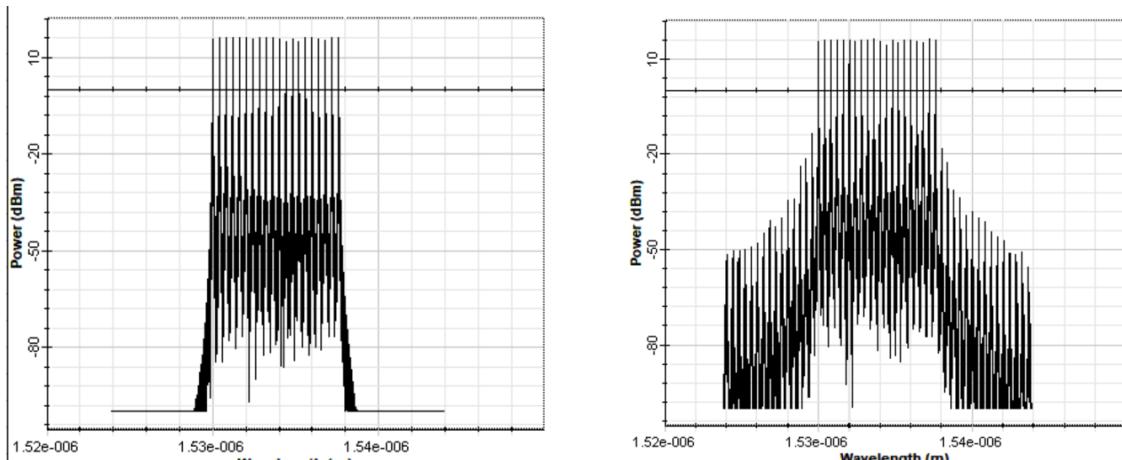


Рис 1. Спектри вхідного та вихідного сигналів у мережі зв'язку з 20 каналами передачі даних в діапазоні 1530- 1538 нм довжиною 50 км з врахуванням ефектів вимушеного Раманівського розсіювання світла.

Моделювання та розрахунки були виконані в два етапи: перший полягав у визначенні параметрів без врахування жодних нелінійних ефектів, а другий при врахуванні SRS. Ефекти вимушеного Раманівського розсіювання мають суттєвий вплив на WDM-системи з великою кількістю каналів, особливо при високій потужності передавання. Використання програмного моделювання дозволяє ефективно оцінити та оптимізувати параметри системи для зменшення негативного впливу SRS. Запропоновані підходи можуть бути інтегровані у проєктування сучасних пасивних оптичних мереж відповідно до стандартів ITU-T xPON.

Література:

- [1] Agrawal, G.P. *Nonlinear Fiber Optics*, 5th ed., Academic Press, 2013.
- [2] ITU-T Recommendation G.984.2: *GPON Physical Media Dependent Layer Specification*, 2003.
- [3] Corning SMF-28 Fiber Specification Sheet, Corning Inc.
- [4] OptiSystem User Manual, Optiwave Systems Inc., 2020.

Особливості реєстрації тепловізійних сигнатур рухомих та стаціонарних об'єктів при добових і сезонних змінах навколошнього середовища

Є.О. Мележик, П.М. Литвин, З.Ф. Цибрій, В.В. Стрельчук, А.С. Ніколенко, В.В. Забудський, Н.І. Кухтарук, О.Ф. Коломис, А.А. Корчовий, В.І. Попенко, Д.М. Мазяр, М.А. Александров

*Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАНУ
Україна, Київ, пр. Науки 41*

Виявлення, розпізнавання та ідентифікація об'єктів за їх тепловізійними сигнатурами є важливою науково-прикладною задачею, що знаходить своє застосування в багатьох сферах — від екологічного моніторингу і промисловості, до сектору безпеки і оборони та агрономії.

Подібне виявлення відбувається на основі температурного контрасту об'єкту і фону, і, в залежності від необхідної дальності виявлення, стикається з низкою проблем. Це, наприклад, проблеми достовірного виокремлення елементів контуру об'єкта від контрастних елементів фону на близьких відстанях, чи вирізnenня об'єкту в цілому від дерев, будівель, чи інших масивних об'єктів, що на великих відстанях виділяються за температурою на загальному тлі.

Подібні задачі додатково ускладнюються тим, що різні елементи природних та урбаністичних фонів (трава, земля, асфальт, бетон, листяні чи хвойні дерева, кущі і т. п.) мають різну випромінювальну здатність у ІЧ-діапазоні, та різну теплоємність. Відповідно, в один і той же час, всі ці елементи можуть мати різну спостережувану тепловізором температуру. Більше того, зі зміною пори доби чи погодних умов, вони будуть змінювати цю свою температуру із різною швидкістю. Відповідно, температурний контраст об'єктів виявлення із фоном може бути як позитивним, так і негативним. А враховуючи швидку динаміку зміни погодних умов, задача реєстрації об'єктів за їх тепловими сигнатурами набуває всієї своєї складності.

Тому метою даної роботи було експериментально дослідити динаміку зміни реальної та тепловізійно-вимірюваної температури термоізолюючих покриттів під впливом нагрівання та конвекційного охолодження, а також порівняти її з динамікою зміни температури природних фонів у добовому циклі. Зразки термоізолюючих покриттів піддавалися нагріву від програмно контролюваного нагрівача з однієї сторони, і обдуву потоком повітря із фіксованою швидкістю — з іншого. Обдув потоком повітря циклічно припинявся після досягнення зразками термодинамічної рівноваги, і розпочинався знову, коли ці зразки досягали нової рівноваги внаслідок прогріву (див. Рис. 1).

Також нами було проведено вимірювання добових залежностей температури різних типів стаціонарних об'єктів, таких як бетон, трава,

дерева, земля, транспортні засоби, за допомогою стаціонарно встановленого тепловізора та станції контролю погоди.

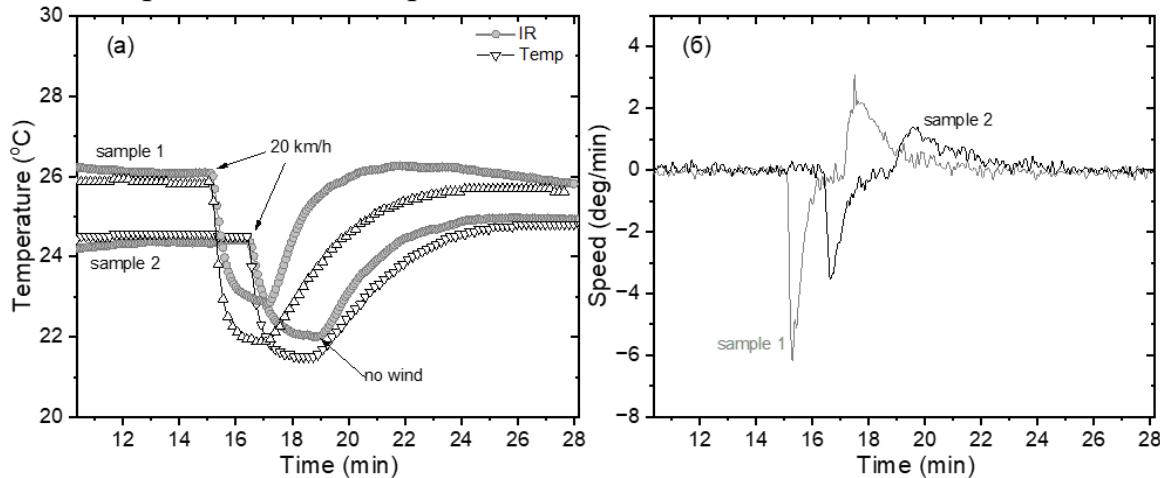


Рис. 1. Залежності контактної та ІЧ температури поверхні зразків в стані теплої рівноваги та при обдуві набігаючим потоком повітря 20 км/год (а). Відповідні швидкості охолодження/нагрівання (б). Температура нагрівача 50 °C.

Вимірювання показали, що для термоізолюючих покріттів, час конвекційного охолодження до температури набігаючого потоку повітря, складає хвилини. При цьому обрана для вимірювань швидкість вітру в 20 км/год може відчуватися як рухомими, так і стаціонарними об'єктами. В той же час, наприклад ранком після холодної ночі, металічні чи бетонні поверхні довго зберігали попередню температуру внаслідок швидкого теплообміну між об'ємом об'єкта і поверхнею, а відповідно, показували виражений негативний температурний контраст з фоном. Таким чином, наявність теплоізолюючих покріттів дозволяє підвищити адаптивність об'єктів спостереження до динаміки зміни температурного фону оточуючого середовища.

Також було встановлено, що збільшення товщини проміжного шару між нагрівачем та термоізолюючим покриттям (Рис. 1(samp.2) з більшою товщиною, порівняно із (samp.1) з меншою), не призводила до суттевого зниження температури поверхні такого покриття. Навпаки, вираженим результатом тут було зменшення швидкості охолодження такої поверхні, а отже збільшення її теплої інерції та відповідне зменшення її адаптивності.

Також, було проведено ряд тепловізійних знімків різноманітних рухомих і нерухомих об'єктів спостереження із різними типами поверхонь, в різні часи доби та досліджено гістограми розподілу температури їх поверхні в порівнянні із характерними природними і урбаністичними об'єктами фону.

В цілому, дана робота має важливе прикладне значення для задач виявлення та ідентифікації об'єктів за їх тепловізійними сигнатурами, та дозволила встановити декілька важливих емпіричних закономірностей стосовно способів та умов зміни їх теплового контрасту.

Дана робота виконана за підтримки гранту НДФУ #2023.04/0026.

Use of chalcogenide films as photo- and electronic resists for the production of master originals of security elements using single-step dry lithography technology

V.Bilanych¹, S.Vorobiov², B.Bilanych¹, Yu.Matyovka¹, V.Rizak¹, A.Feher², V.Komanicky²

¹Uzhhorod National University, Pidhirna 46, Uzhhorod 88000, Ukraine

²Pavol Jozef Šafárik University, Park Angelinum 9, Košice 04001, Slovakia

Modern requirements for information security, including the protection of documents and securities, impose high standards on technologies for creating elements of visual and electronic authentication. Development of high-precision, reliable and effective methods for forming master originals of security elements with a complex micro- and nanostructure is the one of the key areas in this area. Chalcogenide amorphous semiconductors are promising materials for direct recording in lithography due to their high sensitivity to laser and electron irradiation, ability to undergo structural transformations, amorphous-crystalline transformations and formation of surface relief.

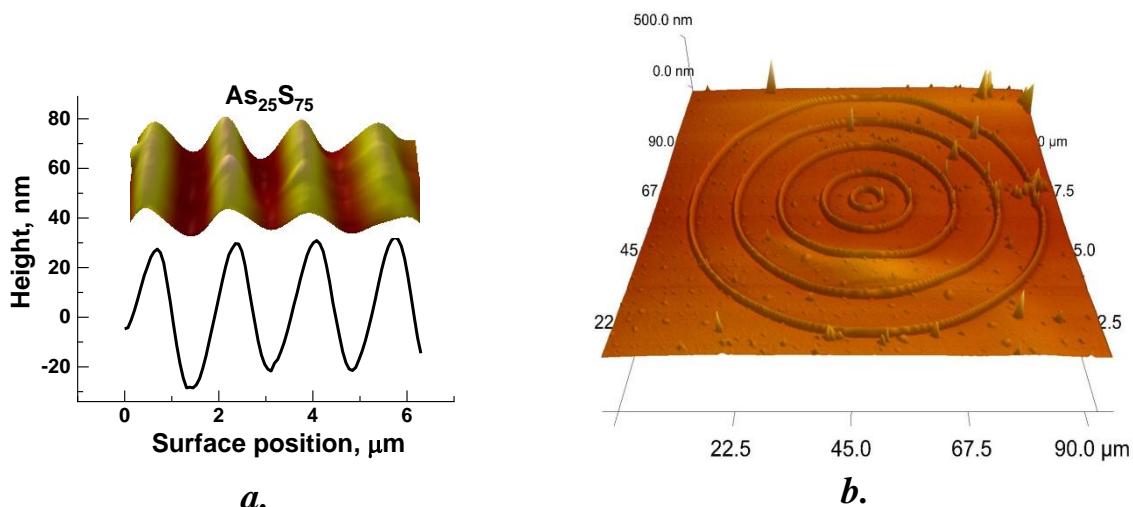


Fig. 1. Laser-induced periodic relief (surface relief grating) on the $\text{As}_{25}\text{Se}_{75}$ film and its cross-section (a), as well as the result of the test for an electron exposure dose of 500 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ when using this film as a negative electron resist (b).

In this paper, we consider the application of chalcogenide films based on Ge-Se and As-Se systems as photo- and electron resists in single-stage lithographic technologies for creating master originals of security elements. The laser-induced effects of surface structuring and direct optical recording of surface relief gratings were studied on a microscale on $\text{As}_x\text{Se}_{100-x}$ and $\text{Ge}_x\text{Se}_{100-x}$ films irradiated with a thin polarized laser beam of a Bruker ICON atomic force microscope. The laser beam interference on the film surface occurred during its diffraction at the cantilever edge. The appearance of the resulting laser-induced surface relief is shown in Fig. 1a. The formed diffraction element on the $\text{As}_{25}\text{Se}_{75}$ film had an amplitude of 32 nm and a period of 1.7 μm at a laser wavelength of 650 nm. The dependences of the

parameters of the surface diffraction elements on the chemical composition and configuration of the experiment were studied.

The efficiency of the electron beam effect on chalcogenide films of the Ge-Se and As-Se systems in the context of their lithographic application was studied. Dose tests for films of some chemical compositions showed good contrast and amplitude of the formed surface relief (Fig. 1 c, Fig. 2 c) with a certain configuration of the lithographic process.

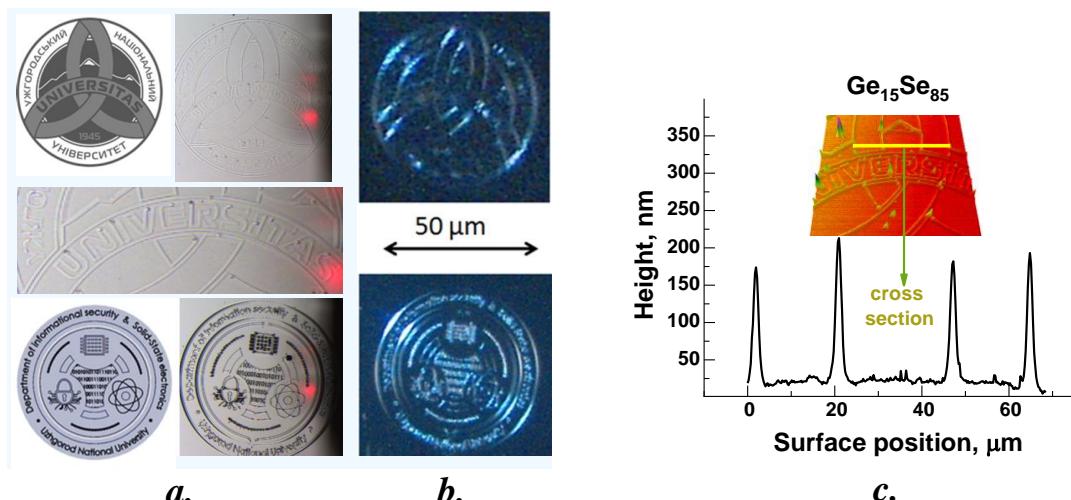


Fig. 2. Images of some logos on the surface of Ge₁₅Se₈₅ film (a) and their metallization (b), as well as the profile of some of their elements (c).

A process for creating originals of security elements on chalcogenide films by dry electron lithography was developed. Logos of some images were made on the surface of chalcogenide films (Fig. 2). "In-Flight Beam Tracing" technology was used for the lithographic process, which allows tracking the characteristics of the electron beam in real time. An analysis of the density of image elements was carried out, the proximity element was taken into account, and various electron beam parameters were selected for the production of image elements. The change in the quality of the surface elements image was studied depending on the electron beam parameters, exposure time, and the structure of the electron resist. As a result, good quality emblem images were obtained on chalcogenide films of a certain chemical composition (Fig. 2). They were coated with metal coatings, which ensured the removal of a replica of the image. Such replicas can be used to manufacture corresponding protective elements by stamping onto a polymer base.

Acknowledgments.

This work has been supported by the grant of the Science and Technology Center in Ukraine under contract № 6436 and grant of the Slovak Research and Development Agency under contract APVV-23-0049.

Удосконалений чутливий елемент сенсора на основі явища поверхневого плазмонного резонансу

Качур Н.В., Маслов В.П., Федоренко А.В.

*Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України,
м. Київ, пр. Науки, 41, 03028*

Поверхневі плазмони – це електромагнітні хвилі, які мають максимум на поверхні та експоненційно спадають перпендикулярно їй [1]. При збудженні поверхневих плазмонів поляризованим світлом відбувається резонансне збільшення електромагнітного поля. В той же час відбувається різке зменшення відбивання через перехід енергії світла в поверхневі плазмони [1]. Це явище називається поверхневим плазмонним резонансом.

Найбільш розповсюдженою конфігурацією ППР-сенсорів є геометрія Кретчмана [2]. На поверхню призми повного внутрішнього відбиття нанесено адгезивний шар (зазвичай хром) товщиною 5 нм та чутлива металічна плівка (зазвичай золото) товщиною 30-50 нм. Поляризоване світло від лазера під кутом θ потрапляє на поверхню плівки і збуджує плазмони. Вимірюється залежність коефіцієнта відбивання від кута падіння світла. Для того, щоб продовжити строк експлуатації призми, чутливу плівку наносять на скляну пластинку [2] з того ж скла, з якого виготовлено призму. Для створення селективності та підвищення чутливості на шар золота наносять додаткові покриття [3, 4], які наносили за вакуумними технологіями. В той же час є проста золь-гель технологія нанесення наношарів з хімічних реакцій. Відпал, який передбачає ця технологія додатково сприяє зменшенню внутрішніх напружень і, відповідно покращенню чутливості, що раніше не досліджувалось.

При проведенні тривалих досліджень рідин та суспензій шар золота деградує, ППР-крива розширяється, похибка визначення ППР-мінімуму збільшується і виникає необхідність заміни чутливого елемента. Однак, можливості створення ППР-сенсорів з захисними шарами для довготривалих вимірювань одним сенсором та переваги золь-гель технології нанесення таких наношарів раніше не досліджувались.

Задачею цієї роботи було створення захисного шару для чутливого шару золота за золь-гель технологією.

Вимогами до такого шару наступні: товщина до 5 нм для того, щоб не впливати на результати вимірювань ППР-сенсором, забезпечувати надійний захист золота від механічного впливу речовин, що досліджуються, та забезпечувати стійкість шару золота до відпалу. Міцність міжатомних зв'язків матеріалу можна охарактеризувати за допомогою температури плавлення, адже вона характеризує енергію, яку треба підвести до системи для руйнування внутрішніх зв'язків.

Виходячи з цих критеріїв, в якості матеріалу захисного шару було обрано оксид цинку, який має температуру плавлення 1975 °C, що вище, ніж для золота (1064 °C).

Товщина нанесеного покриття становила 5 нм забезпечувалась розробленим способом [5]. Рентгенівські дослідження показали, що отримана плівка оксиду цинку має аморфну структуру, а атомно-силова мікроскопія показала, що цей шар суттєво затримав поверхневу дифузію золота і забезпечив суцільність та придатність плівки нанозолота для ППР-досліджень. Проведені дослідження показали, що такий підхід забезпечує збільшення стійкості чутливого елементу до сухого тертя в 2 рази [6], а при дослідженні природної води протягом двох місяців в 20 раз. Крім того, відпал при температурі 500 °C протягом 2 годин та охолодження з пічкою забезпечив рекордно низький рівень внутрішніх напружень в шарі золота – 0,005% [5]. А при відпалі оксид цинку, що утворюється відповідає геометрії вихідної рідини. Такий вдосконалений сенсор показав високу чутливість.

Висновки

Вперше запропонований удосконалений ППР-сенсор з захисним шаром оксиду цинку товщиною 5 нм. Експериментально доведено, що золь-гель технологія нанесення наношару оксиду цинку дозволила удосконалити чутливий елемент, а саме: стійкість до відпалу при температурі до 500 °C в муфельній печі, вищу чутливість в 1,5 рази в порівнянні з традиційним сенсором за рахунок рекордного зменшення внутрішніх напружень (0,005%) в чутливому шарі золота.

Посилання:

- [1] H. Raether, Surface plasmons on smooth surfaces, in: 1988: p. 146.
doi:10.1007/BFb0048319.
- [2] Г.В. Дорожинський, В.П. Маслов, Ю.В. Ушенін, Сенсори на основі поверхневого плазмонного резонансу, НТУУ “КПІ,” Київ, 2016.
- [3] S.M.G. Mousavi-Kiasari, K. Rashidi, D. Fathi, H. Taleb, S.M. Mirjalili, V. Faramarzi, Computational Design of Highly-Sensitive Graphene-Based Multilayer SPR Biosensor, Photonics. 9 (2022) 688. doi:10.3390/photonics9100688.
- [4] C.M. Das, Q. Ouyang, X.-Q. Dinh, P. Coquet, K.-T. Yong, A theoretical insight into the use of anti-reflective coatings for the upliftment of sensitivity of surface plasmon resonance sensors, Opt. Commun. 458 (2020) 124748.
doi:10.1016/j.optcom.2019.124748.
- [5] P.M. Lytvyn, O.Y. Gudimenko, V. Maslov, A.A. Korchovy, N.V. Kachur, Influence of amorphous zinc oxide on structural changes in a gold nanolayer after annealing, Thin Solid Films. 806 (2024). doi:10.1016/j.tsf.2024.140518.
- [6] A. Fedorenko, N. Kachur, O.V. Sulima, V. Maslov, Protective properties of ZnO nanofilm against wear and mechanical damage of sensitive SPR sensor element, J. Funct. Mater. 2 (2024).

Секція 4.
Матеріалознавство,
технології та діагностика
напівпровідникових матеріалів

Section 4.
Materials science, technology and
diagnostics of semiconductor
materials

Фотоіндуковані зміни оптичних параметрів плівок Sb_xSe_{100-x}

Костюкевич С.О.¹, Крючин А.А.², Петров В.В.², Поп М.М.^{2,3}, Рубіш В.В.⁴,
Кайнц Д.І.³, Микайло О.А.³, Рубіш В.М.^{2,3}

¹ Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ, Україна
skostyukevych@gmail.com

² Інститут проблем реєстрації інформації НАН України, Ужгород, Україна

³ Ужгородський національний університет, Ужгород, Україна

⁴ Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна

Аморфні плівки системи Sb-Se володіють високою кристалізаційною здатністю і можуть бути використані в якості порогових датчиків температури та середовищ для створення реконфігуриваних дифракційних елементів [1, 2]. Фотоіндуковані зміни оптичних характеристик і параметрів плівок системи Sb-Se практично не вивчались.

В даній роботі наведені результати досліджень впливу випромінювання зеленого ($\lambda_B=530$ нм) та червоного ($\lambda_B=650$ нм) напівпровідникових лазерів на спектри пропускання та оптичні параметри аморфних плівок Sb_xSe_{100-x} ($x=3-30$).

Тонкі плівки Sb_xSe_{100-x} товщиною $\sim 0.2\text{--}1.0$ мкм одержували методом вакуумного випаровування стекол і сплавів відповідних складів із квазізамкнутих ефузійних комірок на холодні скляні підкладки.

Дослідження спектрів пропускання проводили в області 450-1100 нм при кімнатній температурі з використанням дифракційного монохроматора МДР-23. Спектральне розділення складало не більше 10^{-3} еВ. Засвітку плівок здійснювали росфокусованим випромінюванням лазерів з $\lambda_B=530$ і 650 нм.

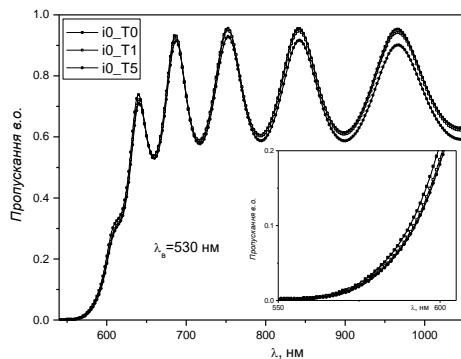


Рис. 1. Спектри пропускання плівок $Sb_{10}Se_{90}$ залежно від часу опромінення t .
 t , хв.: 1 – 0, 2 – 1, 3 – 5

На рис. 1 наведені типові для всіх досліджених плівок системи Sb-Se спектри пропускання номінально чистих та опромінених плівок

($\lambda_{\text{в}}=530$ нм). При $\lambda_{\text{в}}=650$ нм виявлено більш значний вплив часу опромінення на спектри пропускання плівок даної системи.

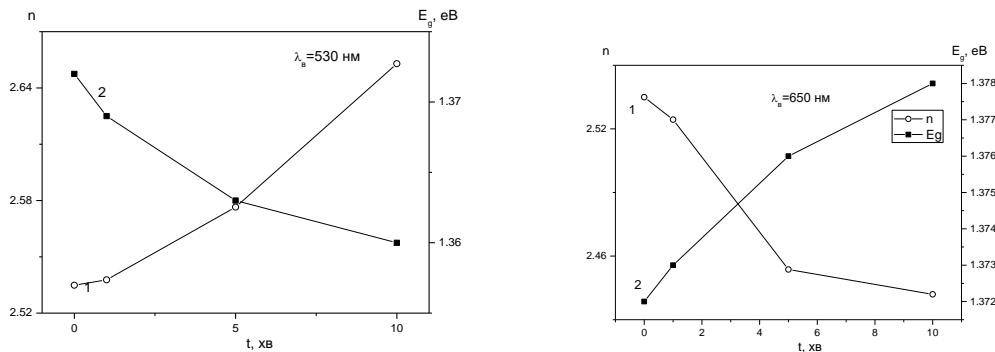


Рис. 2. Залежності n (1) та E_g (2) плівок $\text{Sb}_{20}\text{Se}_{80}$ від часу експонування

При експонуванні плівок системи Sb-Se як зеленим, так і червоним лазерами край поглинання більшості досліджених зразків зміщується у довгохвильову ділянку спектру (проходить фотопотемніння плівок). Це засвідчує про зменшення ширини псевдозабороненої зони E_g плівок та збільшення їх показника заломлення n . Виключення складає плівка $\text{Sb}_{20}\text{Se}_{80}$ у випадку її опромінення червоним лазером. Край поглинання зміщується у короткохвильову ділянку спектру (плівка просвітлюється). Відповідно, E_g зростає, а n зменшується. Значення E_g і n номінально чистих та опромінених плівок $\text{Sb}_x\text{Se}_{100-x}$ визначались по методиках, наведених в [3, 4]. Залежності E_g і n плівок $\text{Sb}_{20}\text{Se}_{80}$ від часу опромінення лазерами з $\lambda_{\text{в}}=530$ і 650 нм наведені на рис. 2.

Обговорюються особливості концентраційних залежностей оптичних параметрів аморфних плівок $\text{Sb}_x\text{Se}_{100-x}$.

Виявлені відмінності в поведінці спектрів пропускання і параметрів плівок при їх засвітці зеленим і червоним лазерами, пов'язані з фотопластичним ефектом [5], який проявляється в плівках при їхній засвітці лазерним випромінюванням з області краю фундаментального поглинання ($\lambda=650$ нм).

1. Петров В.В., Крючин А.А., Костюкевич С.О., Рубіш В.М. Неорганічна фотолітографія. – К.: ІМФ НАНУ. – 2007. – 197 с.
2. Кириленко В.К., Мар'ян В.М., Дуркот М.О. [та ін.] Дослідження аморфних халькогенідних матеріалів елементів пам'яті на основі фазових переходів // Реєстрація, зберігання і обробка даних, 2014. – Т. 16, №2.– С.7-13.
3. Petkov K. Compositional dependence of the photoinduced phenomena in thin chalcogenide films // J. of Optoelectronics and Advanced Mat., 2002.–P. 611 – 629.
4. Swanepoel R. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon // J. Phys. E: Sci. Instrum, 1983.– P. 1214-1222.
5. Yannopoulos S.N., Trunov M.L. Photoplastic effects in chalcogenide glasses: A review // Physica Status Solidi (b). – 2009. – Vol. 246, No 8. – P.1773-1785.

Electron beam induced phenomena in amorphous chalcogenide semiconductors and their applications

V. Komanicky¹, V. Bilanych^{1,2}, S. Vorobiov¹, O. Shylenko¹, S. Soroka¹, V. M. Rizak², P. M. Lytvyn³

¹*Pavol Jozef Šafárik University, Park Angelinum 9, Košice 04001, Slovakia*

²*Uzhhorod National University, Pidhirna 46, Uzhhorod 88000, Ukraine*

³*V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 03680 Kyiv, Ukraine*

Chalcogenide glasses (ChGs) have been used as construction materials in optics and photonics for over 50 years [1]. The original articles about their applications in optical fiber production were published in the 1960s [2, 3]. Subsequently, there was significant progress in their other applications, described in numerous scientific papers [4-6], and many compositions of these materials have been tested. The most promising results for optical applications were obtained with arsenic and germanium-based chalcogenide materials. Their physical and chemical properties—such as a wide transparency range, low optical losses, stability in humid environments, high nonlinearity of optical properties, etc.—led to further technological applications.

ChGs are sensitive to electromagnetic radiation. The absorption of radiation by these materials leads to various photo-induced phenomena [7], such as photo-induced reversible phase transitions on a nanosecond time scale between two structural phases with different electromagnetic properties [8]. Thanks to this property, these materials have found broad commercial use in the production of optical recording media with writing speeds exceeding 200 Mbit/s [9]. These applications exploit the significant difference in reflectivity between the amorphous and crystalline phases. The phase transition is caused by local heating of the material using laser light. Phase transitions can also be induced by electric current. Interestingly, in addition to different reflectivity, the mentioned phases also have different electrical conductivity. This feature enabled further applications in computing technology. One of the latest is phase-change memory (PRAM), where a bit is stored in an island just a few nanometers in size, and the write energy is on the order of a picojoule [10].

The interaction of ChGs with electromagnetic radiation or an electron beam is often accompanied by visible material transport [11]. However, a deeper understanding of the fundamental processes occurring during this phenomenon is currently lacking. The groundbreaking work of Ovshinsky [9], who explained the structural changes in some types of ChGs when irradiated with electromagnetic radiation, led to many important applications of these materials in the computer industry and information storage technology.

The aim of the present work is to advance the understanding of the processes that occur during the interaction of electrons and electromagnetic radiation with ChGs, using state-of-the-art structural analysis methods and other physical techniques.

Presented work is the result of the author's systematic study of external and internal processes taking place in thin layers of ChG-based glasses under irradiation by an electron beam with energies ranging from 10–30 keV. Changes in surface morphology and surface potential after electron beam irradiation were studied using Atomic Force Microscopy (AFM) and Kelvin Probe Force Microscopy (KFM). Based on the observed surface structures, a physical model was proposed describing charge accumulation and dissipation, which explains the observed phenomena. This model will be described in detail. The

model was later confirmed by KFM measurements and further refined. Using advanced synchrotron-based X-ray spectroscopy techniques, processes occurring during electron irradiation of these materials were studied at the atomic level. These results will be presented. Many new discovered phenomena such as the formation of surface structures during electron beam exposure, electrohydrodynamic flow, and stress-induced catalysis—have inspired several application-oriented articles and patents which also be presented.

References

1. R.J. Frerics, J. Opt. Soc. Am., New optical glasses with good transparency in the infrared, 43 (1953) 1153–1154.
2. R.R. Standler, R.E. Henderson, Infrared Physics, Infrared fiber optics technique 3 (1963) 223–227.
3. N.S. Kapany, R.S. Simms, Infrared Physics, Recent Developments in Infrared Fiber Optics 5 (1965) 69–80.
4. T. Katsuayama, H. Matsumura, Infrared Optical Fibers, Adam Hilger, Bristol (1988).
5. G.G. Devyatkh, E.M. Dianov, V.G. Plotnichenko, I.V. Skripachev, M.F. Churbanov, High-Purity Substances, Fiber Waveguides Based on High-Purity Chalcogenide Glasses 5 (1) (1991) 1–27.
6. J. Nishii, T. Yamashita, J.S. Sanghera, I.D. Aggarwal (Eds.), Infrared Fiber Optics, CRC Press, Boca Raton, FL (1998), pp. 143–183.
7. A. Elliott, S.R. Zakrajšek, Journal of Non-Crystalline Solids, Optical Properties and Applications of Chalcogenide Glasses: A Review 330 (2003) 1–12.
8. S.R. Ovshinsky Physical Review Letters, Reversible Electrical Switching Phenomena in Disordered Structures 21 (1968) 1450–1453.
9. M. Yamada, N. Wuttig, Nature Materials, Phase-change materials for rewriteable data storage 6 (2007) 824–832.
10. W. Wuttig, M. Welnic, Materials Today, Reversible Switching in Phase-Change Materials 11 (2008) 20–27.
11. N. F. Mott and R. W. Gurney, Electronic Processes in Ionic Crystals, Dover, N.Y., 1964

Acknowledgments.

This work has been supported by the grants EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V01-00096 grants of the Slovak Research and Development Agency under contracts APVV-23-0049 and APVV-17-0059

The correlation between the topology of nanoclusters and the nature of boson peaks in As-S class glasses

V. Tkáč¹, P. Baloh¹, R. Tarasenko¹, M. Orendáč¹, A. Orendáčová¹, O. Mitsa², V. Mitsa², R. Holomb^{2,3}, A. Feher¹

¹*Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Park Angelinum 9, Košice 040 01, Slovakia.*

²*Uzhhorod National University, Voloshin str. 64, Uzhhorod 88 000, Ukraine.*

³*Wigner Research Centre for Physics, Konkoly-Thege Miklós str. 29-33, Budapest 1123, Hungary.*

The structurally disordered systems are characterized by an excess in the vibration density of the states at low frequencies, known as a boson peak (BP), which is one of the universal behaviors of the glasses. BP can be observed with various experimental techniques, and their combined information can shed light on its origin.

Specific heat (C_p) measurements of the $\text{As}_x\text{S}_{100-x}$ glass system were conducted down to 1.8 K for various compositions ($x = 20, 28.6, 40, 45$, and 50). Universal glass anomalies, the boson peak, and the plateau were observed in C_p/T^3 and thermal conductivity ($k(T)$), respectively [1]. Room temperature Raman spectra of $\text{As}_x\text{S}_{100-x}$ glasses were recorded in the frequency range of 10 - 600 cm⁻¹. Cluster modeling and DFT calculations were performed to aid spectrum interpretation and determine the boson peak position and the sample structures at the nanometric scale [2].

The interplay between the mean coordination and concentration dependencies of elastic modules and low-frequency Raman scattering in As-S glasses provides new insights into the behavior of the spectroscopic boson peak (SBP). This analysis examined the characteristic temperature positions of the thermometric boson peak (TBP) and the heat capacity magnitude in As-S glasses. The study focused on As-S compounds from the first glass-forming region, emphasizing compositions from the flexible, intermediate, and stressed-rigid phases.

The origin of the SBP and TBP is believed to be caused by structural properties. The spectral features observed in the super-low-frequency region of the Raman spectra were attributed to quasi-localized "soft" modes. The sulfur-rich glass, g-As₂S₅, represents the intermediate phase, featuring As_nS_m clusters with closed ends and several "soft" nanoclusters. These soft clusters are likely responsible for the intrinsic quasi-localized "soft" modes, the system's overall rigidity, and quasi-elastic light scattering.

- [1] P. Baloh, V. Tkáč, R. Tarasenko, M. Orendáč, A. Orendáčová, O. Mitsa, V. Mitsa, R. Holomb, A. Feher, J. Non-Cryst. Solids **600** (2023) 122040.
- [2] P. Baloh, V. Tkáč, R. Tarasenko, M. Orendáč, A. Orendáčová, O. Mitsa, V. Mitsa, R. Holomb, A. Feher, J. Non-Cryst. Solids **631** (2024) 122913.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency Project APVV-22-0172, and Scientific Grant Agency of the Ministry of Education, Science, Research and Sport of the Slovak Republic, and the Slovak Academy of Sciences project VEGA 1/0132/22.

Акустичні властивості кубічних кристалів зі структурою аргіродиту.

Микита О.І., Феделеш В.І., Мікла В.Ю.

Ужгородський національний університет, olexandrmykyta@gmail.com

Дослідження акустичних властивостей монокристалічних $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Cu}_7\text{GeS}_5\text{I}$ привертають значний науковий інтерес. Такі матеріали відносяться до сполук зі структурою аргіродиту і кристалізуються у гранецентрованій кубічній ґратці. Їх симетрія описується просторовою групою $F\bar{4}3m$. Ці матеріали характеризуються високою змішаною іонною провідністю і є прямоузонними напівпровідниками [1].

Метою даної роботи було дослідження температурних залежностей пружних властивостей монокристалічних зразків $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$, а також побудова поверхонь (індикаторів) пружних модулів. Діагональні компоненти матриці четвертого рангу C_{ij} постійних жорсткості C_{11} і C_{44} в сучасних умовах вимірюються з високою точністю, компонента C_{12} не визначається безпосередньо жодним з відомих методів, а її значення набувають як малу різницю великих величин [2]. Температурні залежності коефіцієнтів Пуассона кристалів $\text{Cu}(\text{Ag})_7\text{SiS}_5\text{I}$ представлені на Рис. 1. Аналіз цих залежностей показує, що вони є лінійними практично без відхилень та монотонно спадаючими функціями температури.

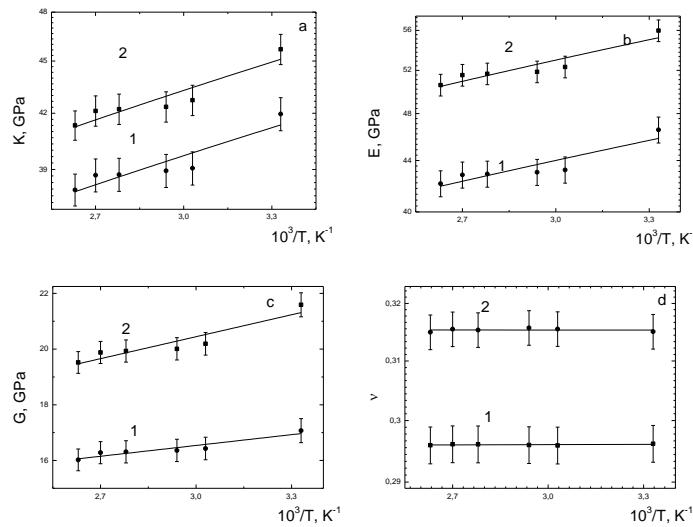


Рис1. Температурна залежність модуля Юнга E (а), модуля всестороннього стиску K (б), модуля зсуву G (с) і коефіцієнта Пуассона v (д) суперіонних кристалів (1) $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та (2) $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$.

Для візуалізації пружних анізотропних властивостей матеріалів виходячи з значень пружних констант використане програмне середовище ELATE: Elastic tensor analysis [3].

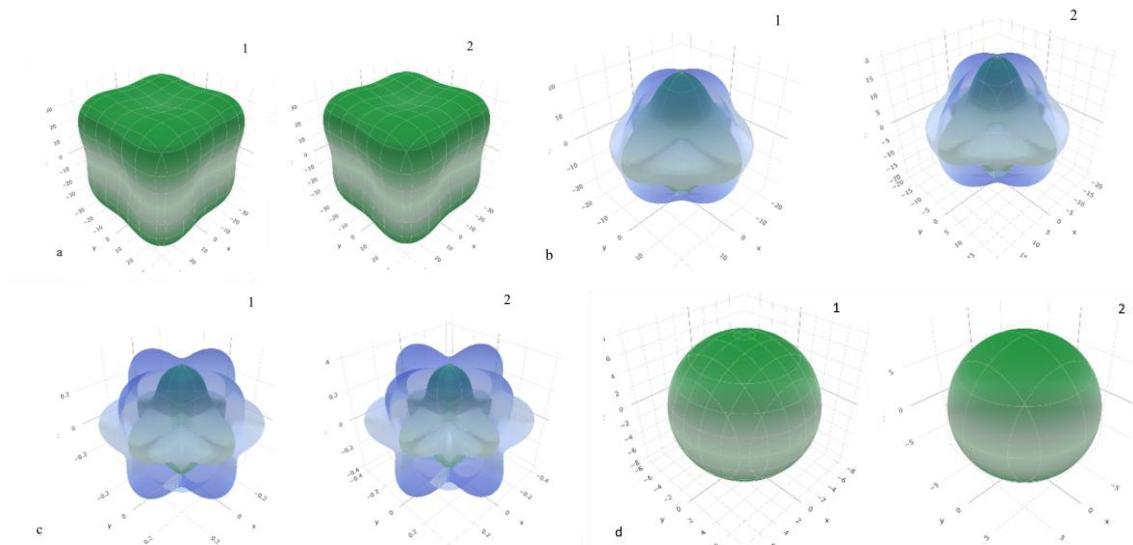


Рис 2. Характеристичні поверхні модуля Юнга Е (а), зсуву G (б), коефіцієнта Пуассона ν (с) та модуля лінійної стисливості β (д) суперіонних кристалів (1) $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та (2) $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$

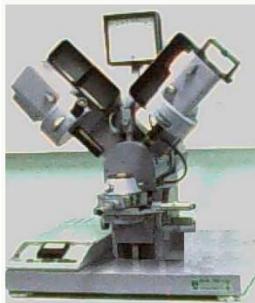
Анізотропія пружності досліджуваних монокристалів демонструється вказівними поверхнями пружних модулів (рис. 2,а-д). З рисунка 2 видно, що модулі модуль Юнга суперіонних кристалів $\text{Cu}(\text{Ag})_7\text{SiS}_5\text{I}$ мають чітко виражений максимум в напрямку [111], та мінімум в [100]. Це свідчить про те, що в напрямку [111] міжатомні взаємодії досягають максимального значення. Характеристичні поверхні модуля Юнга утворюють фігури, які мають усі елементи симетрії, властиві для даних монокристалів. Поверхня модуля лінійної стисливості має повністю ізотропний характер, що вказує на однорідну поведінку матеріалу при рівномірному стисканні. Характеристичні поверхні модуля зсуву мають чітко виражений максимум в напрямку [100]. Характеристичні поверхні коефіцієнта Пуассона практично не змінюються в інтервалі температур 300÷380 К.

- [1] Погодін А. Іг, et al. "Синтез, вирощування та структурні дослідження монокристалів $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та твердих розчинів на їх основі." Науковий вісник Ужгородського університету. Серія: Фізика 43 (2018): 9-14.
- [2] Chick, Bruce B; Elbaum.Ultrasonic methods in solid state physics .1969, New York : Academic Press,464p.
- [3] Gaillac, Romain, Pluton Pullumbi, and François-Xavier Coudert. "ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors." Journal of Physics: Condensed Matter 28.27 (2016): 275201.

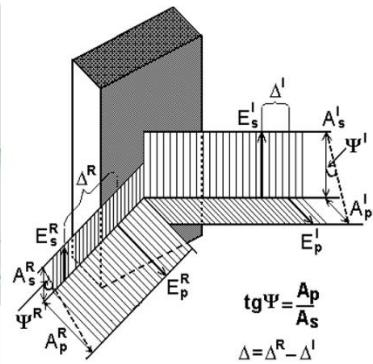
Еліпсометричні вимірювання температурних залежностей комплексного показника заломлення стекол $(\text{As}_2\text{S}_3)_x\text{Ge}_{1-x}$

Жихарєв В.М., Павлишин Р.Є.

Ужгородський національний університет, м. Ужгород, вул. Волошина 54.



Еліпсометр ЛЕФ-3М-1



Зміна стану поляризації падаючого на поверхню зразка поляризованого світла після відбивання: E_s і E_p – напрямки електрических векторів, (A_s і A_p) – їх амплітуди, Δ^I і Δ^R – зміщення фаз в падаючій (І) і відбитій (R) хвильях.

$$e^{i\Delta} \operatorname{tg} \Psi = \frac{r_p^{1-2} + r_p^{2-3}}{1 + r_p^{1-2} \cdot r_p^{2-3} \cdot e^{-2i\delta}} \cdot \frac{1 + r_s^{1-2} \cdot r_s^{2-3} \cdot e^{-2i\delta}}{r_s^{1-2} + r_s^{2-3} \cdot e^{-2i\delta}}$$

$$\delta = 360 \frac{d}{\lambda} N_2 \cos \varphi_2 = \frac{360d}{\lambda} \sqrt{N_2^2 - N_1^2 \sin^2 \varphi_1} \quad \operatorname{tg} \Psi = \frac{r_p}{r_s} = \frac{N_1 N_2 (\cos^2 \varphi_1 - \cos^2 \varphi_2) + (N_2 - N_1) \cos \varphi_1 \cos \varphi_2}{N_1 N_2 (\cos^2 \varphi_1 - \cos^2 \varphi_2) - (N_2 - N_1) \cos \varphi_1 \cos \varphi_2}$$

Інтервали сканування:
 $\Delta n = 1,5-3,5;$
 $\Delta k = 0,001-1,501$
крок проходження
0,002

$$\frac{A_p^R / A_s^R}{A_p^I / A_s^I} = \frac{A_p^R / A_p^I}{A_s^R / A_s^I} = \frac{\rho_p}{\rho_s}$$

$$\frac{\rho_p}{\rho_s} = \frac{(\operatorname{tg} \Psi)^R}{(\operatorname{tg} \Psi)^I} \cdot \exp[i(\Delta^R - \Delta^I)]$$

$$\frac{\rho_p}{\rho_s} = e^{i\Delta} \cdot \operatorname{tg} \Psi$$

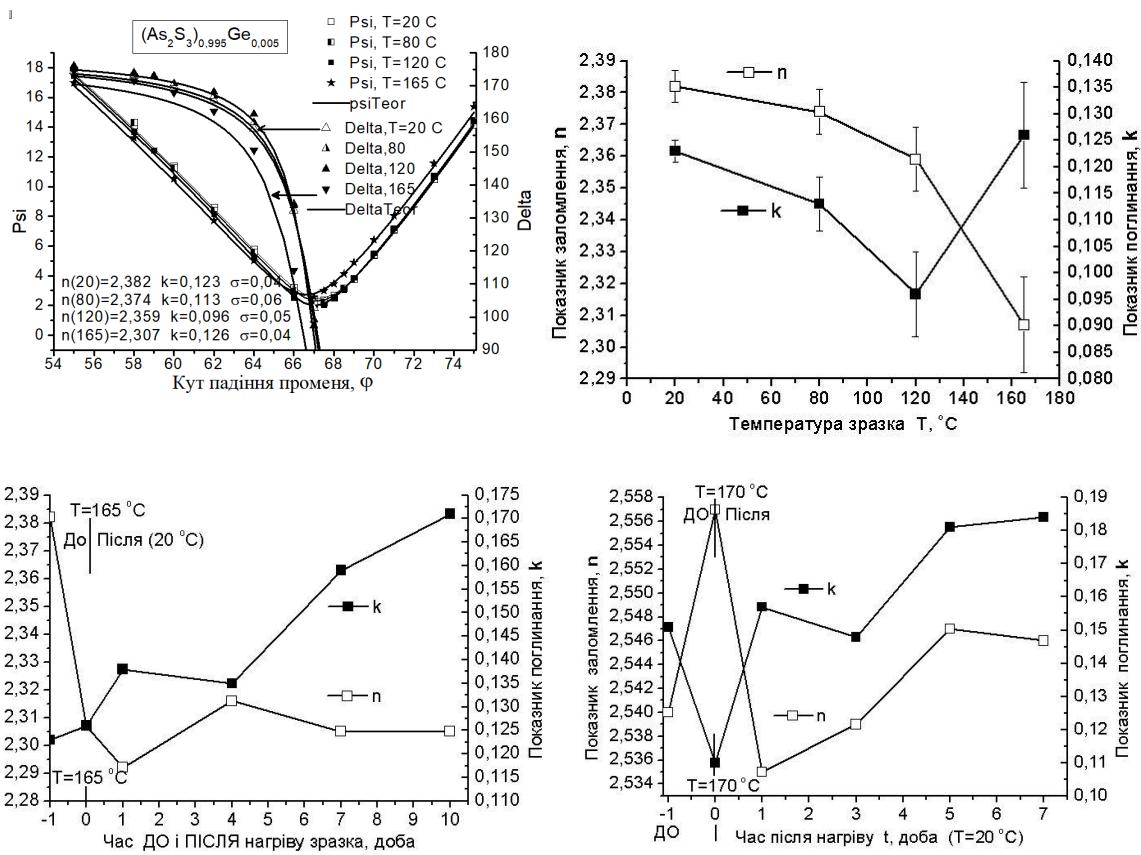
N_1, N_2, N_3 – показники середовищ
 φ_1 – кут падіння
 φ_2 – кут заломлення



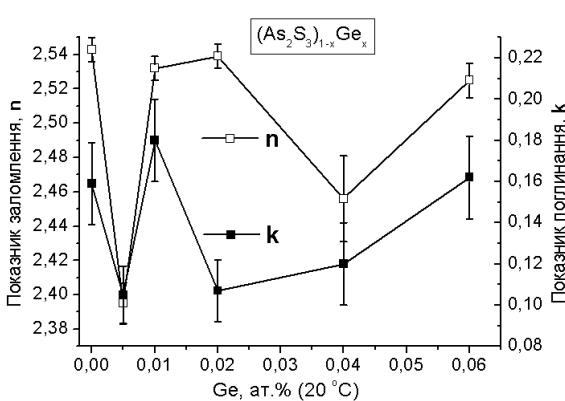
На відміну від “прямого” методу визначення комплексного показника заломлення $N=n-ik$ [1] нами застосовувався обернений метод, коли при даному куті φ_1 падіння лазерного Не-Не променя, у вибраному інтервалі можливих значень (n,k) , які змінюють з певним кроком (див. формули), обчислюють еліпсометричні параметри $(\Psi, \Delta)_{\text{теор}}$ і порівнюють їх з вимірюваним $(\Psi, \Delta)_{\text{експ}}$, фіксуючи ті, що мають найменше СКВ σ – і так для кожного кута φ (графіки $\Psi(777\varphi)$, $\Delta(\varphi)$). Значення (n,k) з найменшими σ за всіма кутами φ_i , видаються як результат вимірювання $N=n-ik$.

Зразки $(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}\text{Ge}_x$ ($X, \text{at.\%} = 0; 0,005; 0,01; 0,02; 0,04; 0,06$) мали форму прямокутних брусків розмірами $\approx 10 \times 4 \times 4 \text{ mm}^3$ з полірованими гранями. До і після температурних досліджень параметри (Ψ, Δ) і показники (n, k) зразків вимірювались декілька разів (в інтервалі декількох діб і навіть тижнів) в різних точках і гранях зразка з метою виявити можливу розбіжність їх значень (похибку). Самі ж температурні вимірювання в одній точці поверхні зразка тривали 5-7 годин.

На рисунках, у якості прикладу, представлені експериментальні і теоретичні залежності (Ψ, Δ) , визначені за ними значення $n(T)$ і $k(T)$ та їх релаксація протягом 7 і більше діб після максимального нагріву – точка (0) на осі часу, маркери над (-1) вказують значення (n, k) перед початком температурних досліджень. Усереднені значення багатьох вимірювань показників n і k зразків As_2S_3 з вмістом германію Ge_x (в at.%) та їх зміна під час нагрівання від 20°C до 140°C наведені в таблиці.



$(\text{As}_2\text{S}_3)_{0.995}\text{Ge}_{0.005}$		$(\text{As}_2\text{S}_3)_{0.99}\text{Ge}_{0.01}$			
$X=0,000$	$X=0,005$	$X=0,01$	$X=0,02$	$X=0,04$	$X=0,06$
n	k	n	k	n	k
2,551	0,131	2,401	0,090	2,525	0,200
2,542	0,131	2,388	0,115	2,530	0,190
2,545	0,195	2,382	0,123	2,540	0,151
2,533	0,179	2,410	0,092		
2,543 $\pm 0,007$	0,159 $\pm 0,02$	2,395 $\pm 0,012$	0,105 $\pm 0,014$	2,532 $\pm 0,007$	0,180 $\pm 0,02$
Зміна n і k при нагр. до 140°C	Δn	Δk	Δn	Δk	Δn
	-0,05	-0,013	0,028	-0,047	0,008
					-0,025
				+0,07	-0,110
					0,039
					-0,035



мають протилежний знак.

- Поперенко Л.В., Сташук В.С., Шайкевич І.А., Одарич В.А. Діагностика поверхні поляризованим світлом: Монографія. – К. ВПЦ “Київський університет”. 2007. – 336 с.

Аналіз даних показує, що вміст Ge_x $X=0,005$ сильно зменшує (n, k), яке продовжується і з нагріванням до $T \approx (120-140)^{\circ}\text{C}$. Більший нагрів, зменшуючи n , веде вже до різкого зростання k , яке можна пояснити зростанням чи виникненням нових поверхневих шарів і структурними змінами у склі. Для більших X зміни Δk і Δn є меншими, а при нагріванні до $T \geq 140^{\circ}\text{C}$ вони вже

ЛАЗЕР ІНДУКОВАНА КРИСТАЛІЗАЦІЯ ІОННО- (C⁺, B⁺) ІМПЛАНТОВАНИХ GeSn ПЛІВОК

Н.В. Мазур¹, В.О. Юхимчук¹, О.Й. Гудименко¹, О.А. Капуш¹, В.С. Єфанов¹, В.М. Джаган¹, П.М. Литвин¹, А.М. Дмитрук², О.В. Косуля¹, О.В. Дубіковський¹

¹*Інститут фізики напівпровідників ім. В.С. Лашкарьова НАН України*

²*Інститут фізики НАН України*

На сьогодні більше ніж 90% електронних пристрій, що виробляються в світі базуються на добре розвинутій та дешевій Si технології і, як свідчать прогнози щодо подальшого розвитку електроніки [1], така тенденція буде зберігатися ще тривалий час. Водночас для Si притаманний суттєвий недолік – він є непрямозонним напівпровідником, що не дозволяє його використовувати в ролі ефективних випромінювачів. Тому йде пошук фундаментальних та технологічних рішень, які б дозволили реалізувати на основі Si прямозонні структури. В останні роки інтенсивно досліджуються Ge_{1-x}Sn_x плівки, електронна структура яких при певному значенні x ($\geq 6,5\%$) [2] трансформується в прямозонну. Ge як і Si є непрямозонним напівпровідником, однак Ge набагато легше трансформувати в прямозонний, що зумовлено невеликою (~ 136 мeВ) різницею енергії між вершинами долин L та Г зони провідності, які визначають непрямозонні та прямозонні переходи, відповідно. Для реалізації останнього в плівках GeSn/Si з наявними в них напруженнями стиску доля Sn повинна бути більшою. Зазначимо, що за нормальних умов в Ge розчиняються не більше 0,5% атомів Sn, що зумовлено значно більшим (162 pm) їх ковалентним радіусом в порівнянні з Ge (137 pm). Отимати Ge_{1-x}Sn_x плівки з високою долею Sn можна нерівноважними методами, зокрема МПЕ, однак останній не є промисловим методом. Тому йде пошук їх отримання іншими методами, зокрема за допомогою магнетронного та термічного розпилення мішеней. Сформовані такими методами плівки є аморфними, тому важливу роль у їх кристалізації відіграють відпали. Термічні відпали, як правило, призводять до значної сегрегації атомів Sn та дифузії їх до поверхні та інтерфейсу плівка/підкладка. Щоб зменшити ці процеси можна використати фотонні та лазерні відпали. Інша ідея, реалізація якої дозволяє зменшити сегрегацію атомів Sn в процесі відпалів, – це додаткова інкорпорація в GeSn плівку атомів, що мають значно менший ковалентний радіус в порівнянні з атомами Ge. Незначний відсоток вбудованих в Ge гратку таких атомів дозволяє компенсувати локальні напруження, які створюють атоми Sn. Тому метою цієї роботи було дослідження впливу імпульсних лазерних відпалів на властивості GeSn, GeSn:C і GeSn:B плівок, сформованих термічним розпиленням відповідних мішеней.

Методом термічного розпилення Ge та Sn мішеної на попередньо сформований 100 нм Ge буферний шар на Si підкладці осаджувалися Sn та Ge шари, з товщинами ~ 2 та ~ 17 нм, відповідно. Пластина з плівкою розрізалася на 3 частини, в одну з яких імплантувалися іони C⁺ (E=50 кеВ, D=6,2·10¹⁵ іон/см²), а в іншу іони B⁺ (E=50 кеВ, D=1,6·10¹⁵ іон/см²), остання частина залишалася неімплантованою і використовувалася для порівняння.

Сформовані плівки відпалювалися за допомогою імпульсних лазерів: наносекундного з $\lambda = 455$ нм та фемтосекундного з $\lambda = 800$ нм. Для кристалізації аморфних плівок густини потужності лазерного випромінювання підбиралася експериментальним шляхом. Відпалені плівки досліджувалися методами раманівської

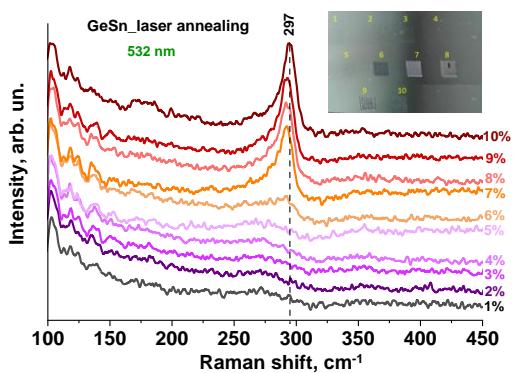


Рис. 1. Раманівські спектри 10 шарової Ge/Sn структури відпаленої імпульсним лазером при варіюванні потужності у відсотках до повної потужності лазеру.

спектроскопії, XRD, XPS, СЕМ та АСМ. На рис. 1 наведено раманівські спектри не імплантованої GeSn плівки, відпаленою наносекундним імпульсним лазером з різною потужністю. Видно, що при потужностях лазеру 7 - 10 % від повної в спектрах домінує Ge-Ge смуга, що відповідає кристалічній фазі GeSn плівки. З частотного положення цієї смуги оцінено вміст вбудованих атомів Sn в плівці, що складає 5 ат. %. Згідно частотних положень Ge-Ge смуг в раманівських спектрах плівок GeSn:C і GeSn:B вміст атомів Sn на 1% більше. Останнє свідчить, що імплантация іонів C⁺ або B⁺ в плівку сприяє більш ефективному вбудуванню атомів Sn в Ge гратку. Відпал GeSn плівок за допомогою фемтосекундного лазеру показав, що в процесі взаємодії лазерного випромінювання з плівкою, можуть реалізуватися декілька сценаріїв: аблляція плівки; відривання її від підкладки та скручування в мікротрубку та формування, так званих ЛПС (лазер індукованих плазмонних структур) [3].

1. N. Margalit, C. Xiang, S.M. Bowers, et al. Perspective on the future of silicon photonics and electronics. *Appl. Phys. Lett.* 118, 220501 (2021).
2. S. Gupta, B. Magyari-Köpe, Yo. Nishi, K.C. Saraswat Achieving direct band gap in germanium through integration of Sn alloying and external strain. *J. Appl. Phys.* 2013. 113. P. 073707. <https://doi.org/10.1063/1.4792649>.
3. S. Shangguan, J. Zhang, W. Wang, et al. Study on the periodic structure of polycrystalline GeSn prepared by femtosecond pulse laser direct writing. *Optics & Laser Technology.* 167, 2023, 109606. <https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2023.109606>.

Робота підтримана НФДУ проект № 2023.03/0186 «Деформаційна інженерія електронної структури тонких плівок GeSn для ІЧ оптоелектроніки нового покоління».

Properties of pulsed laser deposited MWCNT thin films

Virt I.¹⁾, Stefaniuk I.²⁾, Cieniek B.²⁾, Potera P.²⁾

¹⁾*Department of Physics, Institute of Physics, Mathematics, Economics and Innovative Technologies Drohobych State Pedagogical University I.Franko, Ukraine;*

²⁾*College of Natural Sciences, Institute of Materials Science and Engineering University of Rzeszow, Poland*

Carbon materials have significant application prospects in modern electronics [1]. Pulsed laser deposition (PLD) is a process in which laser radiation is used to "knock out" carbon materials from the surface layers of a target and deposit them on a substrate to form stoichiometric single- and multilayer coatings with special properties. Today, PLD technology is of great interest in such industries as microelectronics, micro- and nanophotonics, since obtaining high-quality film structures is a priority direction in these areas. The experimental PLD system developed and used to deposit nanocarbon layers has been previously described. The KGd(WO₄)₂ laser was used – radiation characteristics: $\lambda = 1067$ nm, pulse duration $t = 20$ ns, beam energy density 6–8 J/cm², repetition rate 1–0.3 Hz. The technology module uses the Q-switch to irradiate in modulated goodness factor mode. The ablation of the polycrystalline MWCNT targets was performed in a quartz chamber; the final pressure in the deposition chamber was 10⁻⁶ Pa. Carbon nanotube thin films were prepared by the laser ablation method by laser deposition of compressed nanocarbon (nanotubes) targets. The target for the deposition technology was made of MWCNT pressed powder. The dimensional parameters of the nanotubes were 6-10 nm by 2 μm . We use carbon fiber as the target.

Microstructure studies were performed using X-ray diffraction SEM. The studies showed that the synthesized nanotubes were quite uniform in diameter and formed bundles of 15–20 nm in size. The crystal structure of all MWNT layers before and after thermal treatment (annealing at 400 °C for 10 min) was determined by X-ray diffraction analysis, mainly on silicon substrates. Clear peaks are observed, in particular, at angles of 27°, 42° and 92° 2θ. Scanning electron microscope images were obtained for annealed and unannealed samples. Nanocarbon domains are clearly visible in SEM images, while the distance between nanotube layers can be estimated at approximately 0.5 nm. The lateral size of the ordered regions is 10 nm. There is also a cluster of carbon nanospheres (CNS), the size of which changes with the change in substrate temperature. Agglomerates with an average size of ~40 nm were observed.

This physical effect is one of the methods of identifying both the material and its structure. From the experiment it was found that this energy is 4.5 electron volts. Comparing with the literature [2], we can say that the resulting thin carbon film has one of the structural modifications of the

graphene-like structure. The second method of obtaining nanoclay films was the direct melting of carbon into the glass surface. The carbon nanoparticle powder was poured on a substrate (glass plate). However, it is known that the presence of a surface film of graphene leads to an increase in the microhardness of the material. Therefore, it can be assumed that the film obtained on the glass surface may have a graphene-like structure.

The obtained values of E_I and E_{II} were 84 meV and 145 meV, respectively (Fig. 1). The value of the activation energy $E_{II} = 145$ meV obtained from the conductivity data is small compared to the optical energy of the band gap ($E_g = 1.93$ eV) [2]. This confirms that while the activation energy corresponds to the energy required to conduct from one site to another, the optical band gap corresponds to a different transition.

For the analysis of films, their absorbency was measured in the wavelength range of 0,2-3,0 μm on a spectrometer. The absorption capacity of light is characterized by a coefficient called absorption A (this is the product of the absorption coefficient by the film thickness). Absorption is determined by the ratio of light intensity (in particular, input I_0 and output I). That is, $I=I_0 \cdot \exp(-Ad)$, A the parameter depends on the wavelength of light. If the absorption is represented not by the wavelength but by the energy of the photons of light, we can estimate the energy of the photons of light at which there is a sharp diffusion of light absorbing layer.

Therefore, it can be assumed that the film obtained on the glass surface may have a graphene-like structure. This physical effect is one of the methods to identify both the material and its structure. However, it is known that the presence of a surface film of graphene leads to an increase in the microhardness of the material.

References

- [1]. L.S. Salah, N. Ouslimani, D. Bousba ets. “Carbon Nanotubes (CNTs) from Synthesis to Functionalized (CNTs) Using Conventional and New Chemical” Approaches Journal of Nanomaterials, ID 4972770, P. 1-31, 2021.
- [2]. M. Jouni, P. Fedorko, C. Celle, ets. “Conductivity vs functionalization in single-walled carbon nanotube flms” SN Applied Sciences, V.4:132, P. 1-14, 2022.

Raman and EPR characterization of Fe_3O_4 nanoparticles and their composites with polymer

Mazur N.¹, Konchits A.A.¹, Shanina B.D.¹, Vorona I.P.¹, Isaieva O.¹, Gule E.G.¹, Zambzickaitė G.², Mikoliunaite L.², Talaikis M.², Yukhymchuk V.O.¹ Dzhagan V.¹

¹ V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, prospect Nauky, 41, Kyiv-03028, Ukraine.

² Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University and Center for Physical Sciences and Technology, LT-01513 Vilnius, Lithuania

Colloidal Fe_3O_4 nanoparticles (NPs) and thereon based composites with inorganic and organic materials have been intensively investigated in the past decade for numerous applications, such as hyperthermic treatment of tumors, targeted delivery of drugs, Surface-Enhanced Raman spectroscopy (SERS) [1,2]. Most of the research has been devoted to testing different NP morphologies and analytes. Much less addressed was gaining a deeper understanding of the relation between structural and magnetic properties of these systems, in particular how their magnetic properties are influenced by polymers used as stabilizer during the NP synthesis and embedding medium in the intended application.

Here we report a series of Fe_3O_4 NPs synthesized at different condition with and without using polyethylene glycol (PEG) studied by Raman and Electron Paramagnetic Resonance (EPR) spectroscopies. Both Raman and EPR spectra were deconvoluted into components, and correlation were observed between the spectral features and conditions of the NP synthesis, such as presence or absence of the polymer, temperature and duration of the synthesis.

This project has received financial support from the Research Council of Lithuania (LMTLT) and Ministry of Education and Science of Ukraine, agreement no. S-LU-24-9 “Exploring magnetoplasmonic interactions in $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Au}(\text{Ag})$ nanoparticles for multifunctional SERS applications”

1. I. Mukha, O. Chepurna, N. Vityuk, et al, Multifunctional magneto-plasmonic $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Au}$ nanocomposites: approaching magnetophoretically-enhanced photothermal therapy // Nanomaterials-2021.-**11**.-P.1113.
2. G. Sirgedaite, M. Talaikis, G. Niaura, L. Mikoliunaite. Magneto-plasmonic nanostructures for SERS: magnetite decorated by silver and gold nanoparticles // New J. Chem.-2023.-**47**.-P.402.
3. R. Massart. Preparation of aqueous magnetic liquids in alkaline and acidic media // IEEE Transactions on Magnetics-1981.-**17**.-P.1247 – 1248.

The features of the Urbach absorption edge of glassy $\text{AsS}_3\text{-GeS}_4$ thin films at thermal treatment

M. Ciobanu, D. Tsiulyanu

Technical University of Moldova, bd. Dacia 41, Chisinau 2060, MOLDOVA

The experimental investigation results of the fundamental optical absorption in the region of Urbach tail of glassy thin films of the $\text{AsS}_3\text{-GeS}_4$ system are presented and discussed. The morphology, elemental composition, structural medium - range order of the films, as well as the spectral distribution of the both extinction coefficient and refractive index in the visible and near IR spectral region were reported in our previous work [1,2]. In these works, it was shown that although the $\text{AsS}_3\text{-GeS}_4$ glasses belong to so-called, structural self - organized materials [3], the thin films based on the same can exhibit essential structural and optical distortions caused by influence of the technology of preparation. In this context, present work is devoted to investigation of the Urbach tail of the fundamental optical absorption edge of glassy $\text{AsS}_3\text{-GeS}_4$ thin films that is known to be very sensitive to structural disordering. At that, two aspects were addressed: effect of the composition and post fabrication thermal treatment on characteristic energy of the Urbach edge. The films were grown via thermal vacuum ($\sim 10^{-4}$ Pa) evaporation of powder of relevant glasses onto optical quartz substrates, using the technology described in [1,2]. Measurements were performed using a Woolam Vertical-Variable Angle Spectroscopic Ellipsometer, in a spectral range 275 – 1770 nm, at 45° , 60° and 75° angles of incidence. The absorption coefficient (α) was determined using the data on extinction coefficient determined from ellipsometry analysis [2]. The absorption edge was found to be typical for disordered glassy materials, but only the spectral range $h\nu < E_g$, with an exponential dependence of absorption coefficient on the photon energy (Urbach tail) was considered. Fig.1 (a) displays the absorption spectra of the fresh prepared films under investigation. One can observe that the energy range of these spectra corresponds to that of the Urbach tail with α

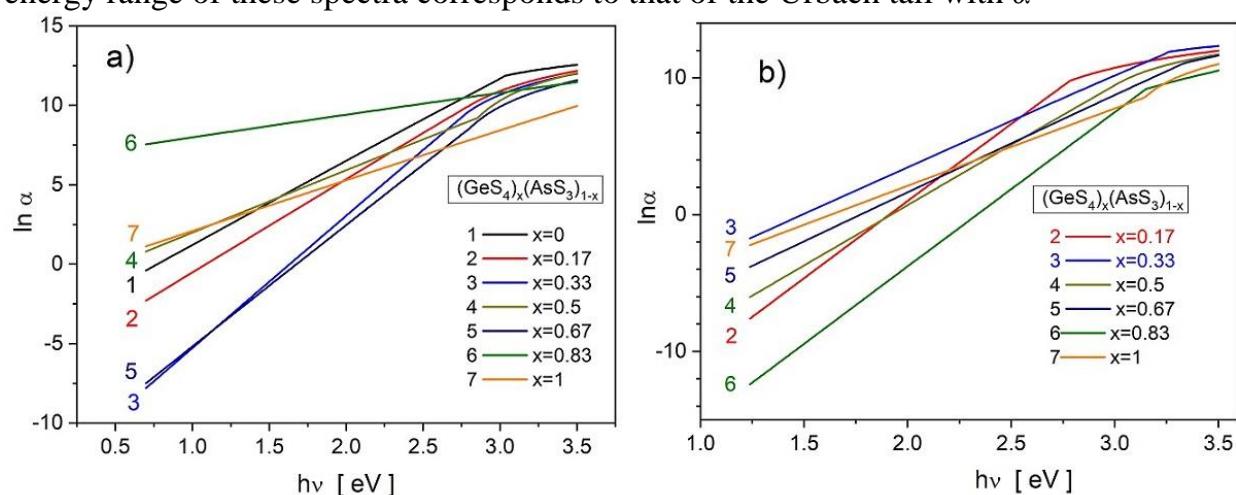


Fig. 1. The Urbach absorption tail of the fresh prepared (a) and thermal treated (149 °C / 24 h) glassy thin films of the $\text{AsS}_3\text{-GeS}_4$ system.

expressed as:

$$\alpha = \alpha_0 \exp\left[\frac{h\nu - E_g}{\Delta}\right] \quad (1)$$

where Δ is the characteristic energy, determined from the slope of the tail. Alongside, it is seen that the slope of the exponential absorption edge strongly and nongradual varies with composition change. The thermal treatment (149°C / 24 h) influences both the spectral position and slope of the exponential tail (Fig. 2 b). The values of the characteristic energies, calculated using the expression (1) for both fresh prepared and annealed thin films are listed in Table 1.

Table 1. Composition and characteristic energies of the fresh (Δ_0) and thermally treated (Δ_t) $(\text{GeS}_4)_x(\text{AsS}_3)_{1-x}$ thin films.

Nr	Composition	[x]	Fresh (Δ_0)	Annealed (Δ_t)	$\delta = \Delta_t - \Delta_0$
1	$\text{As}_{25} \text{S}_{75}$	0	0.19	-	-
2	$\text{Ge}_4 \text{As}_{20} \text{S}_{76}$	0,17	0.17	0.21	0.04
3	$\text{Ge}_{7,7} \text{As}_{15,3} \text{S}_{77}$	0,33	0.12	0.34	0.22
4	$\text{Ge}_{11,1} \text{As}_{11,1} \text{S}_{77,8}$	0,50	0.26	0.26	0
5	$\text{Ge}_{14,3} \text{As}_{7,1} \text{S}_{78,6}$	0,67	0.13	0.32	0.19
6	$\text{Ge}_{17,2} \text{As}_{3,5} \text{S}_{79,3}$	0,83	0.70	0.20	- 0.5
7	$\text{Ge}_{20} \text{S}_{80}$	1,00	0.32	0.40	0.08

One can be seen that, in the most cases the thermal treatment leads to a nongradual enhance of Δ by adding germanium, except of compositions nr.4 ($\text{Ge}_{11,1} \text{As}_{11,1} \text{S}_{77,8}$; $x = 0.5$) and nr.6 ($\text{Ge}_{17,2} \text{As}_{3,5} \text{S}_{79,3}$; $x = 0.83$), in which the characteristic energy remains unchanged ($\delta = 0$) or drastic decreases ($\delta = - 0.5$ eV) respectively. The nature of the Urbach tail is considered to be caused by exponential variation of the density of localized states at the band edges [4], consequently the Δ is a measure of the topological and compositional disorder of the glassy system. In this context, the results of the present work concur with data of our previous papars as the fresh films of composition nr.4 ($x = 0.5$) appeared to exhibit the maximal level of the self-organisation [1] at the atomic level and have not to be affected by annealing, while those of the composition nr.6 ($x = 0.83$) are inhomogeneous due to inhibition of a great quantity of the nanoscale separated stoichiometric As_2S_3 forming in during their growth [2] that obviously can be repair by post preparation thermal treatment.

- [1] M. Ciobanu, A.C. Galca, F. Sava, M.Y. Zaki, A. Velea, D. Tsiulyanu, Thin Solid Films, 773 (2023) 139828 (1-8). <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2023.139828DF>.
- [2] Ciobanu Marina, Tiuleanu Ana-Maria, Tsiulyanu Dumitru, Materials Science Forum, 1145 (2025)15-23. <https://doi.org/10.4028/p-Hs07IL>.
- [3] S. Chakravarty, B.S. Almutairi, R.Chbeir et al.,Phys. Status Solidi B 257 (2020) 2000116 (2-17), <https://doi.org/10.1002/pssb.202000116>.
- [4] S. John, M.Y. Chou, M. H. Cohen, C.M. Soukoulis, Phys. Rev. B 37, (1988) 6963-6976. DOI: [10.1103/physrevb.37.6963](https://doi.org/10.1103/physrevb.37.6963)

Структурне і спектроскопічне дослідження фотоіндукованих перетворень у склах системи Ag–As–S

Ю. М. Ажнюк¹, В. О. Юхимчук², А. І. Погодін³, М. Й. Філєп⁴,
В. В. Лопушанський¹, В. Ю. Ізай⁵, В. М. Кришеник¹,
І. М. Войнарович¹, О. В. Гомоннай¹

¹ Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна

² Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України,
Київ, Україна

³ Ужгородський національний університет, Ужгород, Україна

⁴ Закарпатський угорський інститут ім. Ферена Ракоці II, Берегово, Україна

⁵ Університет ім. Яна Коменського у Братиславі, Відокремлене відділення 03853
Турани, Словаччина

Напівпровідникові скла на основі As_2S_3 відомі насамперед завдяки фотоіндукованим структурним змінам, що спостерігаються в них під дією світла, і пов'язаним з ними можливостям для застосувань у ряді галузей оптики й оптоелектроніки. Серед склоподібних матеріалів на основі сульфіду арсену, модифікованих металами, найбільш вивчені системи Ag–As–S. Науковий інтерес до аморфних матеріалів Ag–As–S обумовлений їх іонною провідністю й можливістю застосування їх як твердих електролітів, а також їхніми термоелектричними властивостями.

Нами досліджено структурні та оптичні властивості склоподібних матеріалів $(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}\text{Ag}_x$ з вмістом срібла x до 0.4, які отримано сплавленням попередньо синтезованого As_2S_3 та колоїдного срібла при 600 °C у вакуумованих кварцових ампулах при постійному помішуванні, витримкою при цій температурі впродовж 4 год та швидким гартуванням на повітрі. Аморфну структуру зразків та відсутність кристалічних фаз підтверджено рентгенодифрактометричними вимірюваннями (дифрактометр AXRD Benchtop, Cu K α випромінювання).

Вимірювання енергодисперсійних рентгенівських спектрів (ЕДС) для зразків $\text{Ag}_x(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}$ з $x \leq 0.2$ підтвердили однорідність хімічного складу зразків та його відповідність заданому співвідношенню елементів у шихті. Водночас для зразків $\text{Ag}_x(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}$ з $x > 0.2$ встановлено неоднорідність хімічного складу з існуванням областей з підвищеним і пониженим вмістом срібла.

Дослідження спектрів раманівського розсіювання, проведені при кімнатній температурі на спектрометрі XPlora Plus (Horiba) при збудженні твердотільним лазером ($\lambda_{\text{exc}}=532$ нм) з густинною потужності P_{exc} від 0.4 до 100 кВт/см² та на спектрометрі МДР-23 при збудженні лазером з $\lambda_{\text{exc}}=671$ нм з $P_{\text{exc}}=1$ кВт/см², підтвердили аморфний характер усіх зразків. Для зразків $\text{Ag}_x(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}$ з $x \leq 0.2$ у спектрах, отриманих при $\lambda_{\text{exc}}=671$ нм, спостерігається характерна для аморфного As_2S_3 широка домінантна смуга з максимумом біля 340 см⁻¹ (пов'язана насамперед з коливаннями зв'язків As–S піраміdalних груп AsS_3 , а також з менш помітним

внеском коливань інших структурних груп) та значно менш інтенсивні смуги в області $130\text{--}230\text{ cm}^{-1}$, що відповідають коливанням інших структурних груп. У спектрах, отриманих при $\lambda_{\text{exc}}=532$ нм, структура низькочастотної групи раманівських смуг більш розмита з максимумами поблизу 180 і 230 cm^{-1} , які пов'язують з коливаннями гомополярних зв'язків As–As у групах As_4S_4 та As_4S_3 .

Зазначимо, що в отриманих нами спектрах $\text{Ag}_x(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}$ з $0.1 < x \leq 0.2$ не спостерігається очікуваної появи відомого для склоподібних матеріалів Ag–As–S максимуму в області $360\text{--}375\text{ cm}^{-1}$, який пов'язують з коливаннями зв'язків As–S піраміdalьних груп AsS_3 , з'єднаних містковими атомами срібла. Однак зі збільшенням вмісту срібла x спостерігається трансформація домінантної раманівської смуги, збільшення її ширини та зміщення максимуму в область вищих частот. Виділення внеску в раманівський спектр $\text{Ag}_x(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}$, обумовленого наявністю в його складі атомів Ag, чітко вказує на зростання інтенсивності раманівського розсіювання в області з максимумом біля $360\text{--}375\text{ cm}^{-1}$ та відповідне зменшення в області $330\text{--}340\text{ cm}^{-1}$. Таку поведінку можна пояснити зростанням кількості піраміdalьних груп AsS_3 , з'єднаних містковими атомами Ag.

Зазначимо, що для зразків $\text{Ag}_x(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}$ з $x > 0.2$ спектри, отримані від різних точок зразка, відрізняються, зокрема у деяких з них максимум в області $360\text{--}375\text{ cm}^{-1}$ проявляється в явному вигляді або у вигляді добре помітного плеча. Це свідчить про неоднорідність розподілу срібла в цих зразках і узгоджується з даними ЕДС.

Для всіх зразків при $\lambda_{\text{exc}}=532$ нм зі зростанням P_{exc} від 4 kVt/cm^2 до 40 kVt/cm^2 спостерігається перерозподіл інтенсивності раманівських смуг на користь максимумів біля 180 і 230 cm^{-1} . Це свідчить про фотоіндуковану перебудову структурної сітки скла зі зростанням числа структурних груп As_4S_4 та As_4S_3 з гомополярними зв'язками As–As.

Збільшення P_{exc} до 40 kVt/cm^2 ($\lambda_{\text{exc}}=532$ нм) для зразків з $x \geq 0.06$ веде до появи нового вузького пік біля 270 cm^{-1} , пов'язаного з фотоіндукованим утворенням кристалічного As_2O_3 (арсеноліту) на поверхні скла $\text{Ag}_x(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}$. На відміну від нелегованого As_2S_3 , де лінії, пов'язані з As_2O_3 , з'являються під дією ультрафіолетового випромінювання, для $\text{Ag}_x(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}$ цей процес відбувається при опроміненні світлом набагато нижчої енергії з зеленої області спектру, що вказує на ключову роль срібла для перебігу реакції фотоокислення.

Дослідження виконано за підтримки гранту № 2023.03/0013 програми "Передова наука в Україні" Національного фонду досліджень України.

Mechanical properties of $\text{In}_{4/3}\text{P}_2\text{S}_6$ semiconductor under pressure: DFT simulation

T. Babuka¹, K.E. Glukhov¹, L.Yu. Kharkhalis¹, I. Babuka¹

¹Institute of Physics and Chemistry of Solid State, Uzhhorod National University, 54 Voloshin

Recently, considerable attention has been devoted to the van der Waals layered metal thiophosphates (TPS), which are perspective 2D functional materials due to their broad spectrum of electron/ionic transport, as well as optical, ferroelectric, pyroelectric, and magnetic properties (see ref. [1], [2]). Two-dimensional nanomaterials are well-suited for strain engineering because they can withstand significant strain, and the strain in two-dimensional materials can modify the atomic and electronic structure and optical properties.

The study of the effect of strain on electronic properties requires knowledge of the mechanical properties, specifically the elastic constants, which describe the response to an applied stress. The mechanical properties of semiconductors are of particular interest for their applications. Previously, the effect of stress on AgInP_2S_6 and CuInP_2S_6 crystals in the works [3, 4] was described.

This contribution focuses on the theoretical calculations of the electronic and mechanical properties of $\text{In}_{4/3}\text{P}_2\text{S}_6$ crystal and their variations with pressure. First-principles Density Functional Theory has been exploited in the present calculations to analyze the impact of pressure on unit cell geometry, energy parameters, and stress constants. In particular, the analysis of mechanical properties suggests that this compound remains mechanically stable up to a pressure of 60 GPa. The electronic band structure for $\text{In}_{4/3}\text{P}_2\text{S}_6$ evidences a semiconductor nature (Figure 1). Notably, the calculated bandgap is 1.409 eV at zeroth pressure and nonmonotonically decreases to 0 eV at 60 GPa.

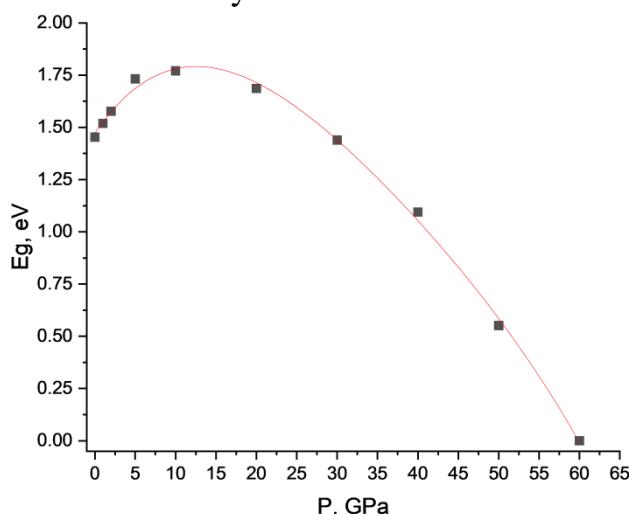


Figure 1. Calculated values of the indirect band gap under compression using the DFT approach.

The pressure was increased step by step from 0 GPa to 60 GPa through an interval of 10 GPa, and the effect of this gradual increasing pressure on the lattice parameters and cell volumes is revealed. The results show an expected

gradual decrease in the value of the lattice parameters and the cell volume as the pressure increases.

The many properties of materials, such as their brittleness, isotropic and anisotropic properties, etc., are crucial for their device applications and engineering. All materials have the potential to deform and shatter suddenly in response to external forces because they are brittle and ductile, respectively [5]. A material's ductile and brittle characteristics may be determined using Poisson's ratio (ν), Cauchy pressure, and Pugh's ratio. A substance will display a brittle nature when the B/G is less than 1.75 and a ductile nature when the B/G is greater than 1.75. Poisson's ratio is a crucial element that allows for the theoretical collection of necessary information about the material. A substance is classified as covalently, ionic, or metallically bonded if its ν value is 0.1, 0.25, or 0.33, respectively [6]. In our case, Poisson's ratio is 0.27 at 0 GPa and smoothly increases with increasing pressure up to 0.37 GPa (50 GPa). Poisson's ratio exceeds 0.50 for non-central forces in solids and is between 0.25 and 0.50 where the interaction of central forces predominates. When $\nu < 0.26$, the material exhibits a brittle nature; otherwise, it is ductile [7]. Our results verify that $\text{In}_{4/3}\text{P}_2\text{S}_6$ exhibits a brittle nature between 0 and 10 GPa, and from 10 GPa exhibits a ductile value rise as pressure increases.

- [1] H. Zhou, J. Zhou, S. Wang and [et al], Size effect on optical and vibrational properties of van der Waals layered $\text{In}_{4/3}\text{P}_2\text{S}_6$, *APL Mater.* **10**, 061111 (2022).
- [2] M. Susner, M. Chyasnavichyus, A. Puretzky [et al.], Cation–Eutectic Transition via Sublattice Melting in $\text{CuInP}_2\text{S}_6/\text{In}_{4/3}\text{P}_2\text{S}_6$ van der Waals Layered Crystals, *ACS Nano*. **11**, 7060–7073 (2017).
- [3] Z. Jiapeng, H. Qiushi, L. Ying, L. Xinyu, Z. Xiande, G. Silin, Q. Jing, and L. Guanjun, Abnormal Evolution of a Layered Structure and Band Gap in AgInP_2S_6 under Compression, *The Journal of Physical Chemistry C*, **35**, 03LT01 (2023).
- [4] F. Sixue, D. Qing, L. Zonglun, and [et al], *Phys. Chem. C*, **127**, 17, 8383–8388 (2023). Significant Enhancement of Optoelectronic Properties in CuInP_2S_6 via Pressure-Induced Structural Phase Transition. *The Journal of Physical Chemistry C*, **127** (17), 8383-8388 (2023).
- [5] Azeem, W., Shahzad, M.K., Ali, T., Wong, Y.H., Sfina, N.: Structural, electronic, mechanical, and optical properties of the lead-free halide perovskites $X\text{GeCl}_3$ ($X=\text{Cs, K, and Rb}$) for the photovoltaic and optoelectronic applications. *Chin. J. Phys.*(2023).
- [6] Rubel, M.H., Hossain, K.M., Mitro, S.K., Rahaman, M.M., Hadi, M.A., Islam, A.K.M.A., Comprehensive first-principles calculations on physical properties of ScV_2Ga_4 and ZrV_2Ga_4 in comparison with superconducting HfV_2Ga_4 . *Mater. Today Commun.* **24**, 100935 (2020).
- [7] Shahzad, M.K., Hussain, S., Farooq, M.U., Abdullah, A., Ashraf, G.A., Riaz, M., Ali, S.M.: First principle investigation of tungsten-based cubic oxide perovskite materials for superconducting applications: a DFT study. *J. Phys. Chem. Solids* **186**, 111813 (2024).

Аналіз фрактальної розмірності Х-променевих кривих

Баловсяк С.В., Заплітний Р.А., Яковлев І.С., Янчук І.В.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федъковича,
вул. Коцюбинського 2, 58012, Чернівці, Україна

Кутовий розподіл інтенсивності Х-променевих кривих гайдання $I_h(\omega)$ містить інформацію про досліджувані кристали: тип і концентрацію мікродефектів, значення деформацій кристалічної гратки, густину дислокацій та ін. Завдяки таким кривим, отриманим за методиками Х-променевої дифрактометрії, можливо досліджувати характеристики кристалічних з'єднань телуриду кадмію, що має важливе теоретичне та практичне значення [1]. Проте, кристали CdTe характеризуються різноманітною дефектною структурою, зокрема, поліблочністю. Це значно ускладнює аналіз експериментальних Х-променевих кривих, оскільки блоки кристалу можуть бути орієнтованими під різними кутами. Кожен блоку кристалу, який знаходиться у відбиваючому положенні, формує певний пік кривої (рис. 1). Тому в роботі запропоновано проводити аналіз Х-променевих кривих із використанням їх фрактальної розмірності D_f [2], значення якої пропорційне до складності форми сигналу.

Фрактальна розмірність D_f для одновимірних сигналів знаходитьться в діапазоні від 1 до 2. Наприклад, для кривих з одним піком, які за формуєю близькі до розподілу Гауса, $D_f \rightarrow 1$, а для кривих складнішої форми (особливо мультиплетних) $D_f > 1$. Для експериментальних кривих $I_h(\omega)$, заданих в Q точках, обчислювалася фрактальна розмірність Мінковського (Minkowski) або розмірність покриття (Box-Counting Dimension) за формулою

$$D_f = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log(N(\varepsilon))}{\log(1/\varepsilon)}. \quad (1)$$

де $N(\varepsilon)$ – мінімальна кількість множин (відрізків) розміром ε , якими можна покрити сигнал.

Близькою до фрактальної розмірності Мінковського є розмірність Хаусдорфа. У даній роботі використано розмірність Мінковського, оскільки програмне обчислення такої розмірності виконується з вищою швидкодією. Розроблено програму на мові Python для обчислення та аналізу фрактальної розмірності Х-променевих кривих. Згідно із формулою (1) для дискретних значень розмірів відрізків ε обчислено мінімальні кількості відрізків N , якими можна покрити криву (рис. 2). Отриману в логарифмічному масштабі залежність $N(\varepsilon)$ апроксимовано прямою (Line), кут нахилу якої рівний значенню фрактальної розмірності D_f . Для аналізу форми кривої також обчислено кількість її піків Q_P , амплітуда яких перевищує сусідні значення $I_h(\omega)$ більш ніж на $5\sigma_N$, де σ_N – середнє квадратичне відхилення шуму кривої.

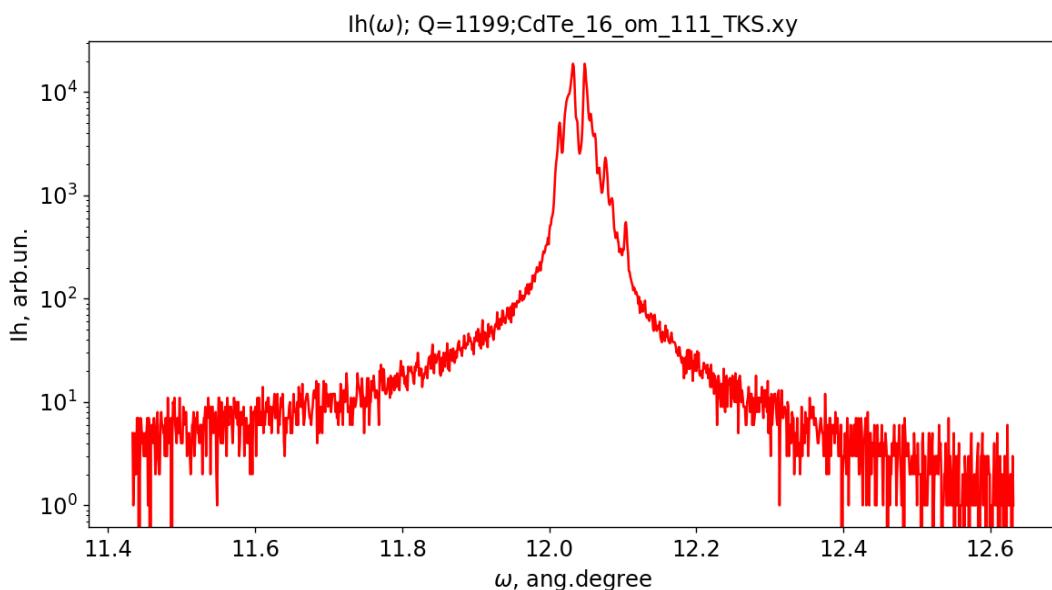


Рис. 1. Початкова Х-променева крива $I_h(\omega)$, отримана від кристалу CdTe №16 [1].

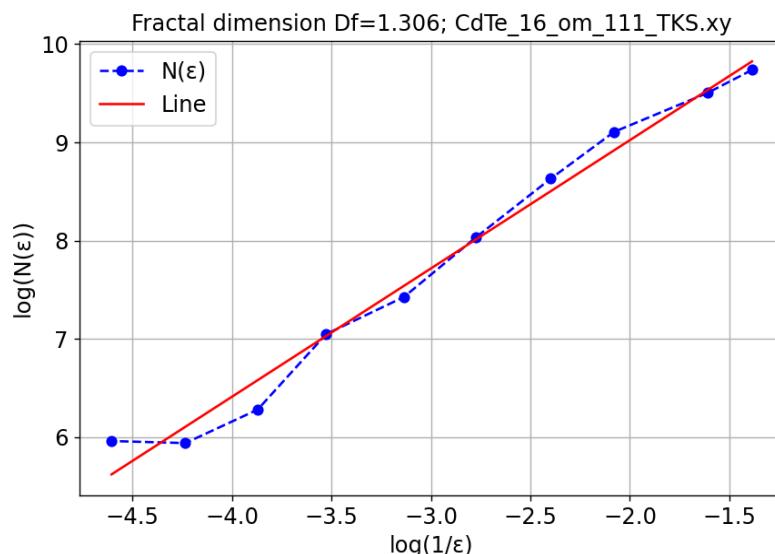


Рис. 2. Залежність мінімальної кількості N розміром ϵ , якими можна покрити сигнал $I_h(\omega)$ (рис. 1), від $1/\epsilon$ у логарифмічному масштабі.

Отримано кореляцію між значеннями фрактальної розмірності D_f та кількістю її піків Q_P (які відповідають окремим блокам кристалу). Таким чином, аналіз фрактальної розмірності Х-променевих кривих дозволяє врахувати поліблочність досліджуваних кристалів CdTe.

Список використаних джерел

- Фодчук І.М., Кузьмін А.Р., Гуцуляк І.І., Солодкий М.С., Маслянчук О.Л., Роман Ю.Т., Кладько В. П., Гудименко О. Й., Молодкін О. Й., Лізунов В. В. Високороздільча Х-променева дифрактометрія кристалічних сполук з розвиненою дислокаційною структурою. *Металофізика та новітні технології*. 2021. Т. 43, № 10. С. 1289-1304.
- Nayak S,R., Mishra J. On Calculation of Fractal Dimension of Color Images. *International Journal of Image, Graphics and Signal Processing (IJIGSP)*. 2017. Vol. 9, No. 3. P. 33-40.

Charge-discharge processes in ceramic cells based on $\text{Ag}_{7-x}(\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x)\text{S}_5\text{I}$

V. Bilanych^{1,2}, S. Vorobiov², A. Pogodin¹, S. Hryhorevsky¹, V. Komanicky²

¹*Uzhhorod National University, Pidhirna 46, Uzhhorod 88000, Ukraine*

²*Pavol Jozef Šafárik University, Park Angelinum 9, Košice 04001, Slovakia*

Silver-based superionic conductors have high ionic conductivity, a wide range of homogeneity, and the ability to fine-tune transport properties due to substitution in the cation and anion sublattices. Research and understanding of charge-discharge processes in such materials contributes to the development of new functional nanostructured systems and expands their application areas in modern electrochemistry and materials science.

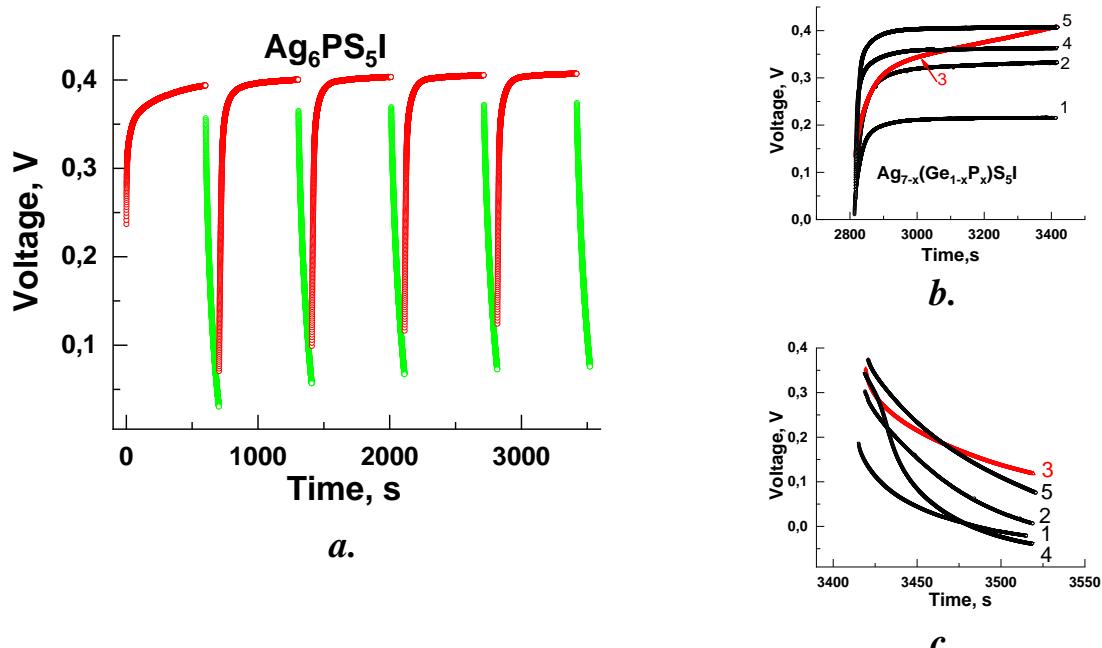


Fig. 1. Charge-discharge curves of solid-state cells based on $\text{Ag}_{7-x}(\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x)\text{S}_5\text{I}$ ceramics: a.– five consecutive cycles for the $\text{Ag}_6\text{PS}_5\text{I}$ composition; b. – charge curves and c. – discharge curves for the fifth cycle of cells with ceramics of different chemical compositions.

This paper presents the results of studies of electrochemical cells based on solid electrolytes made of superionic ceramics $\text{Ag}_{7-x}(\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x)\text{S}_5\text{I}$. Silver was used as the anode since silver ions are charge carriers in solid solutions and ceramics $\text{Ag}_{7-x}(\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x)\text{S}_5\text{I}$. A selenium film was used as a cathode. The inclusion of a selenium intermediate film in the structure made it possible to implement a heterostructure that promotes effective ionic conductivity and a specific distribution of electric potential in the cell structure. As a result, the “Se|SE|Ag” structure was fabricated. Cylindrical ceramic samples with a diameter of 10 mm and a thickness of 2 mm were made for the study from solid electrolyte (SE) $\text{Ag}_{7-x}(\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x)\text{S}_5\text{I}$ of various concentrations ($x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$). The ceramics were obtained by recrystallization of micropowders of the corresponding composition. Gold contacts were applied

to the bases of these cylindrical structures. Wire contacts were attached to them, ensuring the connection of the cell to the potentiostat.

The nature of the charge-discharge curves of the manufactured cell demonstrates the presence of exponential dependencies, which indicates the relaxation nature of the processes occurring in the system (Fig. 1). The charging curve was approximated by a function of the form: $U(t) = U_0 + U_1 \exp[-(t - t_0)/\tau_1]$.

The parameters τ were determined, which characterize the effective charge relaxation time constant, which allows us to consider the model equivalent of the structure as an RC chain. The shape of the charging curve indicates the presence of interphase polarization and charge redistribution processes within the volume of the solid electrolyte. The volt-ampere characteristic of the Ag|SE|Se electrochemical cell was studied, which reflects the typical behavior of solid-state systems involving superionic transfer of Ag^+ ions (Fig. 2).

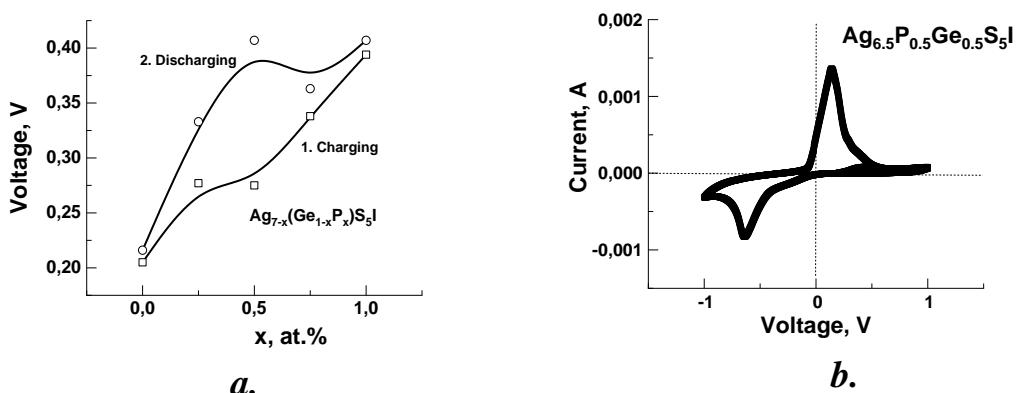


Рис.2 Концентрационные зависимости характерных параметров для процессов зарядки – разрядки и вольт-амперная характеристика электрохимической ячейки Ag|Ag_{7-x}(Ge_{1-x}P_x)S₅I|Se.

Current increase with a maximum of about 0.15 V is observed at positive potentials. This is due to the active reduction of Ag^+ at the boundary with the selenium film and possible formation of Ag_2Se . The subsequent decrease in current indicates polarization effects and an increase in resistance at the interface. Reverse scanning reveals hysteresis and partial reversibility of the processes, which can be due to the capacitive nature of the system and the dynamics of phase formation. Such a CVC is typical for cells with interphase electrochemical reactions, where the interface plays a key role in controlling the transport of ions and electrons.

Acknowledgments.

This work has been supported by the grants EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V01-00096 grant of the Slovak Research and Development Agency under contract APVV-23-0049.

Електричні властивості плівок ZnO легованих Cu

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

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

Оксид цинку (ZnO) є перспективним напівпровідниковим матеріалом, який широко використовується в оптоелектронних пристроях, сенсорах та тонкоплівкових сонячних елементах. ZnO має широку заборонену зону ($E_g \sim 3,37$ eV), високу хімічну та механічну стабільність, а також є недорогим і нетоксичним матеріалом. Природно він проявляє *n*-тип провідності через власні дефекти, але керування його електричними властивостями можливе шляхом легування відповідними домішками.

Легування ZnO елементами III групи періодичної таблиці елементів Al та Ga дозволяє зберегти *n*-тип провідності матеріалу, підвищивши його провідність, тоді як отримання стабільного ZnO *p*-типу залишається актуальним. Одним із перспективних легуючих елементів для модифікації електричних властивостей ZnO є мідь (Cu), яка може діяти як акцептор або донор залежно від своєї концентрації та розташування в кристалічній решітці сполуки. Метод синтезу також суттєво впливає на формування дефектної структури та електрофізичні характеристики плівок. Серед різних методів отримання плівок ZnO одним із найефективніших і доступних є метод пульсуючого спрей-піролізу з молекулярних розчинів, який забезпечує рівномірне розподілення домішки у матеріалі.

Метою цього дослідження є вивчення електричних властивостей плівок ZnO, нанесених методом пульсуючого спрей-піролізу та легованих Cu, залежно від концентрації домішки.

Плівки ZnO:Cu (CZO) були отримані методом пульсуючого спрей-піролізу з використанням молекулярних розчинів $Zn(CH_3COO)_2$ та $Cu(CH_3COO)_2$. Солі цинку та міді змішували у визначених співвідношеннях, утворюючи прозорий молекулярний розчин, у якому номінальна концентрація міді у прекурсорі становила 0, 1, 2, 3, 5 та 7 ат.%, а фактичні вимірювані значення відповідали 0,66, 1,04, 1,59, 2,76 та 3,88 ат.%. Електричні властивості плівок CZO визначали шляхом вимірювання ефекту Холла за методом Ван дер Пау. Вимірювання проводили за допомогою системи вимірювання характеристик Холла Linseis HCS1 за кімнатної температури в атмосферних умовах.

На рис. 1 представлено результати вимірювань питомого опору, холівської рухливості та концентрації носіїв заряду у плівках CZO. Було встановлено, що нелегований зразок ZnO має концентрацію вільних носіїв $n = 1,77 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, рухливість Холла $\mu = 154,13 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ і питомий опір $\rho = 228,9 \text{ Ом см}$. Однак при номінальному вмісті $x = 1$ ат.% Cu (фактичний вміст $x = 0,66$ ат.%) концентрація носіїв і рухливість зросли до $n = 2,27 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ та $\mu = 385,91 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ відповідно, тоді як питомий опір

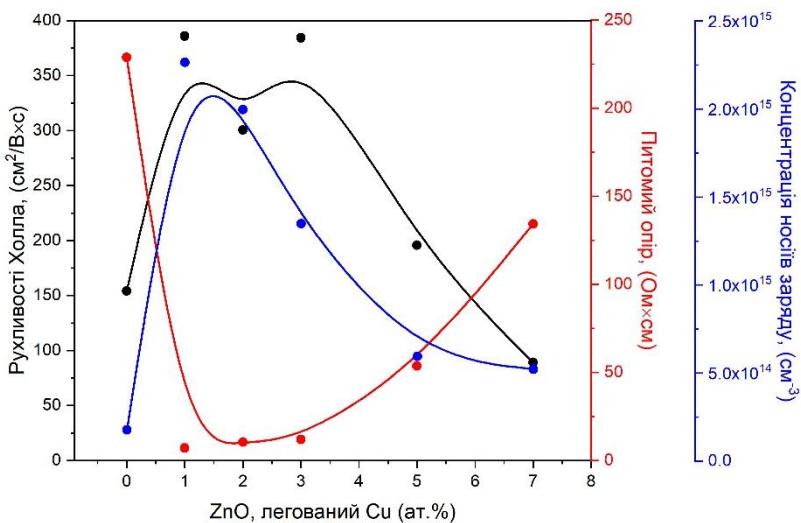


Рис. 1. Залежності питомого опору (ρ), рухливості Холла (μ) та концентрації носіїв заряду (n) у плівках CZO від концентрації міді в прекурсорі

зменшився до $\rho = 7,14 \text{ Ом}\cdot\text{см}$. За цього рівня легування були отримані плівки CZO з максимальною концентрацією носіїв. Проте подальше збільшення вмісту міді призводило до зменшення концентрації носіїв. Введення домішок у концентрації понад $x = 3$ ат.% (фактичний вміст $x = 1,59$ ат.%) спричиняло значне зниження рухливості та концентрації носіїв, а також підвищення питомого опору плівок CZO.

Слід зазначити, що результати електричних вимірювань плівок CZO добре корелюють із даними визначення характеристик субструктурок оксиду, які свідчать про значне зростання рівня мікродеформацій та густини дислокацій, а також зменшення розміру областей когерентного розсіювання (OKP) при номінальному вмісті міді, що перевищує 3 ат.%.

Отже, дослідження електричних властивостей плівок CZO показало, що легування ZnO міддю суттєво впливає на концентрацію носіїв заряду, рухливість Холла та питомий опір. Оптимальні електрофізичні характеристики були досягнуті при номінальному вмісті Cu в прекурсорі $x = 1$ ат.% (фактичний вміст $x = 0,66$ ат.%), що забезпечило максимальну концентрацію носіїв $n = 2,27 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ та високу їх рухливість Холла $\mu = 385,91 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ при низькому питомому опорі $\rho = 7,14 \text{ Ом}\cdot\text{см}$. Однак подальше збільшення вмісту міді спричинило зниження провідності через зростання мікродеформацій і густини дислокаций.

Зразки CZO із вмістом Cu до 1 ат.% демонструють покращені електричні характеристики, що робить їх перспективними для використання у тонкоплівкових сонячних елементах. Водночас, зразки з вищим вмістом Cu, які характеризуються більшою питомою провідністю, можуть бути придатними для застосування у газових сенсорах.

The effect of the defect structure of high-resistance CdTe:Cl single crystals on performance of γ -radiation detectors

I.M. Fodchuk, A.R. Kuzmin, S.V. Balovskyak, M.S. Solodkyi, I.I. Hutsuliak,

V.V. Dovganyuk, R.A. Zaplitnyy, L.V. Drutsul

*Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, 2 Kotsjubynskyi Str., Chernivtsi, Ukraine,
58002*

Cadmium telluride single crystals are actively used to manufacture the X- and γ -radiation detectors due to their ability to operate at room temperatures, unlike silicon counterparts [1]. However, CdTe single crystals typically have a defect structure (small-angle boundaries and high dislocation densities), which further negatively affects detection ability. Although the methods of growing highly perfect crystals are improving, the influence of the defect structure on the electrical and spectroscopic properties of detectors is an ever-present problem. One of the main disadvantage of manufacturing high-efficiency X- and γ -radiation detectors based on CdTe:Cl is the reverse ohmic contact problem. There are no metals that would form an ohmic contact with CdTe:Cl without additional surface treatment. Therefore molybdenum oxide (MoO_x) is used as an interlayer material for formation of a high-quality electrical contact with CdTe:Cl due to its high work function (5.2—6.0 eV).

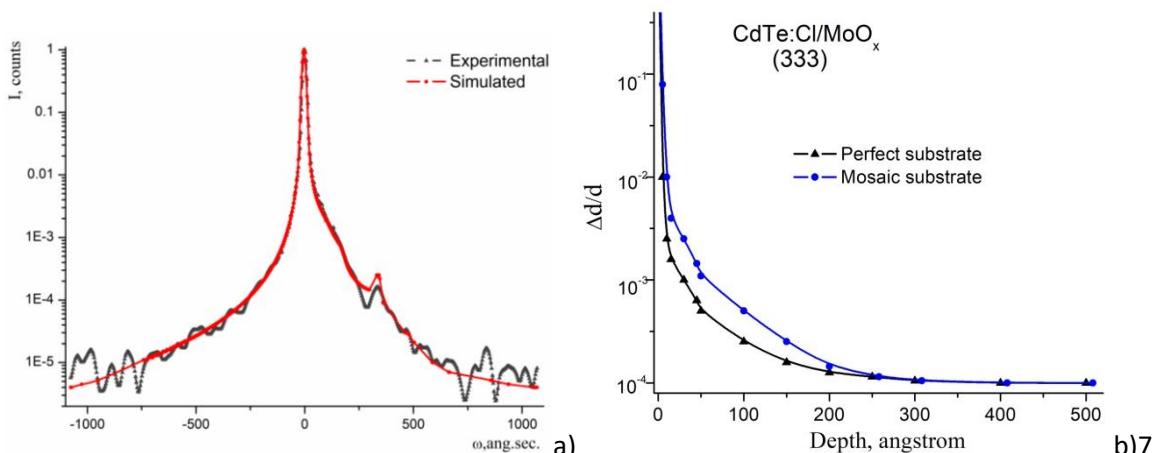


Figure 1. Experimental and simulated rocking curves for CdTe:Cl/MoO_x heterostructure based on the “perfect” substrate ((333) reflection) (a); deformation distributions in the near-surface layer of CdTe:Cl single crystal for “perfect” and "mosaic" based CdTe:Cl/MoO_x heterostructures (b).

Clorine doped CdTe single crystals (CdTe:Cl) were grown by the travelling heater method, and MoO_x/CdTe:Cl/MoO_x films were deposited using reactive magnetron sputtering technique. The defect structure of the obtained single crystals and heterostructures was investigated using high-resolution X-ray diffractometry. The optimized models of dislocation systems

based on the Thompson tetrahedron were constructed for CdTe:Cl single crystals. The analysis of the intensity distribution of diffracted X-rays as a function of reciprocal space coordinates and rocking curves was carried out using the kinematic theory of X-ray scattering in real crystals. The comparative analysis of experimental and theoretically predicted values of helical dislocation densities for CdTe:Cl and MoO_x/CdTe:Cl crystals with perfect and mosaic structures were carried out. Two-fold increase in the dislocation concentration was found for MoO_x/CdTe:Cl heterostructures as a result of compression deformations of the CdTe:Cl crystal lattice.

The transitional deformed layer at the boundary between MoO_x film and CdTe:Cl single crystal with a thickness of about 0.1 μm significantly affects the electrical and spectroscopic properties of the obtained systems as materials for γ-radiation detection. The fitting of experimental rocking curves of CdTe:Cl/MoO_x heterostructures was carried out using semi-kinematic theory of X-ray scattering, and deformation distribution in the transition layer was calculated (Figure 1). The calculated deformation profile (the dependence of Δd/d on the coordinate) in the oxide film / single crystal transition layer demonstrates an exponential decline from 10⁻¹ to 10⁻⁴ (Figure 1). This transition layer significantly affects the electrical and spectroscopic properties of the materials [2].

Typical square-root type of the reverse branch of current-voltage characteristics were measured for a heterostructures based on a perfect CdTe:Cl, when for MoO_x/CdTe:Cl heterostructures based on a mosaic substrate, an atypical quasi-linear type of I(V) dependence is observed. The characteristics of the detectors are affected not only by the quality of the initial crystals, but also by the technology of their post-treatment.

References:

1. Brus, V.V., Maslyanchuk, O.L., Solovan, M.M., Maryanchuk, P.D., Fodchuk, I., at all, *Scientific Reports*. 2019. Vol.9, №1. 1065.
<https://www.scopus.com/record/display.uri?eid=2-s2.0-85060944156&origin=recordpage>
2. Fodchuk, I.M., Kuzmin, A.R., Maslyanchuk, O.L., at all, *Physics and Chemistry of Solid State*, 2022, 23 (1), pp. 144-149.
<https://www.scopus.com/record/display.uri?eid=2-s2.0-85128470881&origin=recordpage>

Acknowledgments

This work was partially supported by Ministry of Education and Science of Ukraine (grant number 0125U000832, authors A.R Kuzmin, M.S. Solodkyi, L.V. Drutsul; grant number 0125U001483, authors I.M. Fodchuk, S.V. Balovskyak, I.I. Hutsuliak, V.V. Dovganyuk, R.A. Zaplitnyi).

Модуляційна спектроскопія сильнолегованого n-GaAs(100)

П.О. Генцарь, А.М. Міняйло, Д.В. Пекур, Л.А. Демчина, М.В. Вуйчик,
Ю.П. Кияк, О.І Власенко

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
03028 м. Київ, проспект Науки, 41, rastneg@isp.kiev.ua

В даній роботі проведено дослідження спектрів електровідбивання монокристалів n-GaAs (100) з концентрацією вільних електронів $N = 10^{24} \text{ м}^{-3}$ - 10^{25} м^{-3} . Спектри електровідбивання поміряно в неполяризованому світлі в енергетичному діапазоні 1,3 еВ – 1,6 еВ при кімнатній температурі по електролітичній методиці. Полярність екстремумів електровідбивання, а також залежність їх амплітуд від прикладеної напруги вказує на те, що на поверхні реалізується шар збідення. Поверхневе електричне поле F_s оцінено в припущені, що всі донорні домішки іонізовані ($F_s = \frac{eN}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} L_{TF}$, де ϵ_∞ - діелектрична проникність досліджуваного матеріалу; L_{TF} - глибина проникнення електричного поля ($L_{TF} = \left(\frac{\epsilon_\infty \epsilon_0 k T F_{1/2}(\mu^*)}{e^2 N F_{-1/2}(\mu^*)} \right)^{1/2}$). Для $\mu^* \left(\mu^* = E_F / kT \right) = 2$; $N = 2,9 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$; $\epsilon_\infty = 12$ $L_{TF} = 11,74 \text{ нм}$; $F_s = 2,09 \cdot 10^7 \text{ В/м}$.

Характерний параметр ефекту Франца – Келдиша $\eta\theta$ ($\eta\theta = \left(e^2 F^2 \eta^2 / 2\mu \right)^{1/3}$) для $m_e^* = 0,078 m_0$, $m_p^* = 0,5 m_0$ дорівнює 0,063 еВ.

Проведені експерименти показали, що форма спектрів електровідбивання змінюється в залежності від величини прикладеного до зразків потенціалу, а віддаль між нулями при збільшенні виснаження зростає і, крім того, відсутні осциляції Франца – Келдиша у високоенергетичній області спектру. В області даних електричних полів зміна діелектричної проникності $\Delta\epsilon = \epsilon(E = \eta\omega, F) - \epsilon(E, 0)$ лінійна в залежності від електричного поля F . Крім того, товщина шару виснаження біля поверхні напівпровідника набагато менша, ніж глибина проникнення світлової (електромагнітної) хвилі d ($d = \frac{\lambda}{4\pi n}$) в досліджувані зразки. Параметр уширення Γ дорівнює 0,080 еВ. Нами побудовано також теоретична крива для фізичних параметрів $E_0 = 1,422 \text{ еВ}$; $\eta\theta = 0,063 \text{ еВ}$; $\Gamma = 0,080 \text{ еВ}$. Визначимо час τ енергетичної релаксації фотогенерованих носіїв заряду. Враховуючи, що параметр уширення $\Gamma = 0,080 \text{ еВ}$, то τ ($\tau = \eta/\Gamma$) дорівнює $8,228 \cdot 10^{-15} \text{ с}$. Характерний для ефекту Франца – Келдиша параметр λ_{FK} , який визначає протяжність осциляції хвильової функції квантово-механічної частинки з ефективною масою μ в електричному полі F_s знаходять за формулою

$\lambda_{FK} = \frac{\eta\theta}{eF_s}$. Довжина хвилі електрона з енергією $\eta\theta$ (λ_{FK}) дорівнює 3 нм.

Класична товщина шару збагачення $L = \frac{2kT}{eF_s}$ у нашому випадку рівна

2,4 нм. Глибина проникнення світлової (електромагнітної) хвилі в енергетичному діапазоні 1,3 еВ \div 1,6 еВ змінюється від $d = 17,81$ нм (для $E = 1,6$ еВ) до $d = 21,92$ нм (для $E = 1,3$ еВ).

Експериментальні результати вказують на немонотонну залежність електростатичного потенціалу напівпровідника від координати z . Тобто, енергетична діаграма поверхні n -GaAs (100) (попередньо хіміко-динамічно травленої) містить екстремум. Одержані спектри електровідбивання n -GaAs (100) свідчать, що по порядку чергування екстремумів в спектрі енергетичні зони в напрямку до поверхні нахилені вгору. Оскільки поверхня травлена (поверхневих зарядів немає), то появі такого екстремума може бути пов'язана з тим, що хвильова функція електронів $\psi(z)$ на поверхні рівна нулю. У нас змінюється комплексний показник заломлення \tilde{N} приповерхневого шару напівпровідника (тонкі приповерхневі шари напівпровідників відповідальні за сигнал електровідбивання), який визначається нерівноважною концентрацією носіїв заряду. А занулення хвильової функції електронів на поверхні приводить до того, що енергетична діаграма поверхні містить екстремум. Інша причина появи такого екстремума може бути пов'язана із структурним гетеруванням. Таким чином, із кількісного аналізу спектру електровідбивання визначено фізичні параметри та параметри області просторового заряду приповерхневого шару (глибина проникнення світлової (електромагнітної) хвилі $d = \frac{\lambda}{4\pi n}$) в області фундаментального

оптичного переходу E_0 : енергію оптичного переходу E_0 , електрооптичну енергію $\eta\theta$, феноменологічний параметр уширення Γ , поверхневе електричне поле F_s , енергетичний час релаксації носіїв заряду τ , характерний параметр Франца – Келдиша λ_{FK} . Аналіз спектру електровідбивання n -GaAs (100) показав немонотонний хід електростатичного потенціалу напівпровідника від координати z . Спектри електровідбивання сильнолегованого арсеніду галію із концентрацією електронів $N = 10^{24} \text{ м}^{-3} \div 10^{25} \text{ м}^{-3}$ пояснюються наступними фізичними явищами: модуляція електричного поля поверхневого бар'єру фотогенерованими носіями заряду (електронами і дірками); зсувом Бурштейна-Мосса қраїв поглинання внаслідок заповнення енергетичних зон фотогенерованими носіями заряду; екраниванням носіями заряду їх екситонної взаємодії.

Імпедансні властивості порошкових композитних матеріалів n-InSe – графіт

Боледзюк В.Б., Камінський В.М., Нетяга В.В., Водоп'янов В.М.

Чернівецьке відділення Інституту проблем матеріалознавства

імені І.М. Францевича НАН України,

Iрини Вільде, 5, Чернівці, Україна, 58001, e-mail:chd.ipm@gmail.com

Для створення нових функціональних матеріалів певний інтерес представляють порошкові композитні матеріали з регульованою високою електропровідністю на основі напівпровідника з шаруватою кристалічною структурою і напівметалу терморозширеного графіту (ТРГ). В роботі [1] на основі вимірювання електропровідності в режимі постійного струму встановлено перкаляційний перехід та вивчено механізми електропровідності досліджуваних матеріалів.

В даній роботі приведено результати вимірювання імпедансу композитних матеріалів n-InSe–графіт. Дослідження проведено на вимірюваному комплексі Solartron 1255 в температурному діапазоні 247–333 К в діапазоні частот $0,1 \div 10^7$ Гц з використанням системи УТРЕКС–РТР. Вимірювання проводено для пресованих порошкових композитних матеріалів InSe [x мас. % ТРГ] з різним вмістом ТРГ: x = 4; 8; 12; 16.

Одержані значення питомого опору ρ при $f = 0,1$ Гц дорівнюють $4,51 \cdot 10^5$ для пресованого порошка InSe і $8,19 \cdot 10^{-4}$; $5,52 \cdot 10^{-1}$; $4,61 \cdot 10^{-2}$; $5,07 \cdot 10^{-1}$ (Ом·м) відповідно для композитів x = 4; 8; 12; 16 мас% ТРГ. Зменшення питомого опору на 8 порядків композиту InSe [x = 4 мас. % ТРГ] в порівнянні з InSe підтверджує наявність перкаляційного переходу в області $0 < x \leq 4$ [1]. Еквівалентна електрична схема зразка InSe складається з двох паралельно з'єднаних елементів $R = 5,2$ Ом і $C = 8,6 \cdot 10^{-12}$ Ф і на діаграмі Найквіста залежності Z'' від Z' описується півколом. Елемент C може бути обумовлений ємністю між частинками InSe на границях зерен. Електропровідність на границях зерен $\sigma_{\text{гр}}$ визначається механізмами переходу носіїв заряду в даній області [2, 3]. Від'ємні значення фазового кута θ на частотній залежності $\theta(f)$ також підтверджує наявність елемента C в еквівалентній схемі провідності InSe.

Для композитних матеріалів InSe [x мас. % ТРГ] після порогу протікання еквівалентна схема складається з паралельно з'єднаних елементів R і C та послідовно з'єднаного елемента індуктивності L. Одержані значення їх складали відповідно $C = 8,9 \cdot 10^{-8}$ Ф, $L = 5,97 \cdot 10^{-7}$ Гн; $4,63 \cdot 10^{-11}$ Ф, $6,29 \cdot 10^{-5}$ Гн; $9,2 \cdot 10^{-10}$ Ф, $8,49 \cdot 10^{-6}$ Гн; $5,4 \cdot 10^{-11}$ Ф, $6,23 \cdot 10^{-5}$ Гн відповідно для композитів x = 4; 8; 12; 16. Годограф імпедансу зразка InSe [x = 4 мас. % ТРГ] в цьому випадку має вигляд паралельного осі Z''

променя, що виходить з точки на осі Z' . Індуктивність L в указаних композитах можливо пов'язана з перкаляційним механізмом електропровідності – протіканням струму по електропровідних каналах контактуючих зерен графіту і електромагнітною взаємодією даних електропровідних каналах.

Проведені виміри залежностей імпедансу зразків композитних матеріалів InSe–ТРГ від температури та величини магнітного поля.

[1] V.M. Kaminskii, Z.D. Kovalyuk, V.B. Boledzyuk, P.I. Savitskii, V.I. Ivanov, M.V. Tovarnitskii, Electrical conductivity of composite materials based on n-InSe and thermally expanded graphite. *J. Nano- Electron. Phys.*, 15, 01002 (2023).

[2] J.Y.W. Seto, The electrical properties of polycrystalline silicon films. *J. Appl. Phys.*, 46, 5247 (1975).

[3] S.M. Sze, K.N. Kwok, Physics of semiconductor devices (New Jersey: Wiley: 2007).

Investigation of structural heterogeneity of synthetic diamond crystals from analysis of normalized parameters of electron backscatter diffraction images

M. Borch, M. Solodkyi, S. Balovskyak, I. Hutsuliak, A. Kuzmin, L. Drutsul

*Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, 2 Kotsjubynskyi Str., Chernivtsi, Ukraine
58002*

A model that explains the change of the deformation state in different crystallographic directions for a set of 6 synthetic diamond crystals, obtained by different technological processes, is developed [1]. It is proposed to determine the deformations of local regions of synthetic diamond crystals (s) on the basis of normalized profiles of Kikuchi band intensity and normalized parameters of the energy Fourier spectrum without the use of reference image. The use of normalized characteristics allowed to determine the values of deformations not only for areas of one crystal, but also for different crystals.

It is established that the normalization of areas S_P and S_{P0} under Kikuchi band intensity profile provides the dependence of S_P and S_{P0} only of the profile shape, and also the possibility of analyzing profiles of different widths for Kukuchi patterns obtained for region of different crystals. The value of deformations ε_{PV} for local regions of diamond crystals, which differ depending on the reflecting crystallographic planes, is obtained. This indicates a certain anisotropy of the crystal lattice deformations. The average value of deformations ε_P is calculated on the basis of the values of deformations ε_{PV} .

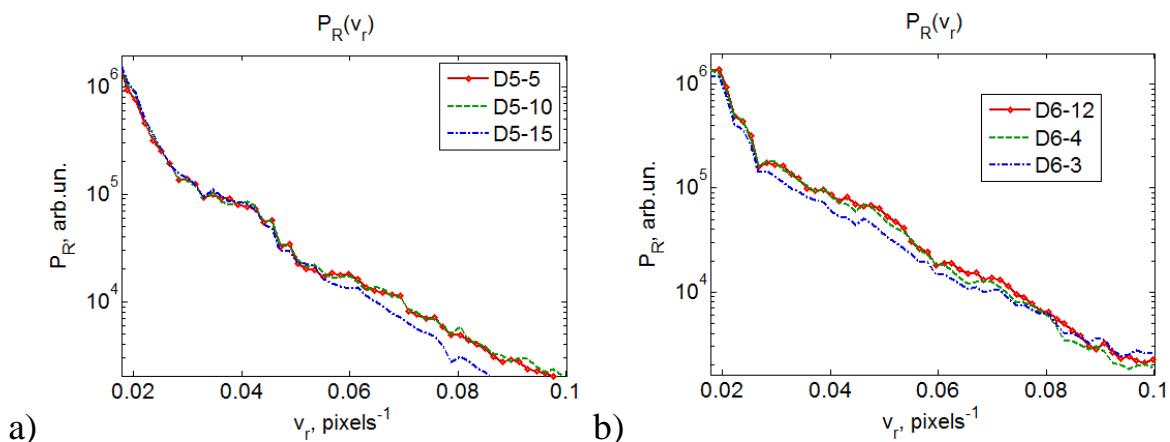


Figure 1. Radial distribution P_R of energy Fourier spectra P_S for the Kikuchi pattern obtained from local regions of synthetic diamond crystals D5 (a) and D6 (b).

The detailed quantitative analysis of deformation state (ε_T) in local regions of a set of synthetic diamond crystals, calculated using the parameters of the energy Fourier spectra of Kikuchi patterns, is performed (figure 1). It is shown that the normalization of the frequency reduces the effect of noise and

the average background of image. It is determined that the normalized mean spatial radial frequency for the region without deformation is 0.075 pixels⁻¹. This value is selected as a referent for all Kikuchi patterns and allows you to calculate and compare the values of deformation for regions of different diamond crystals.

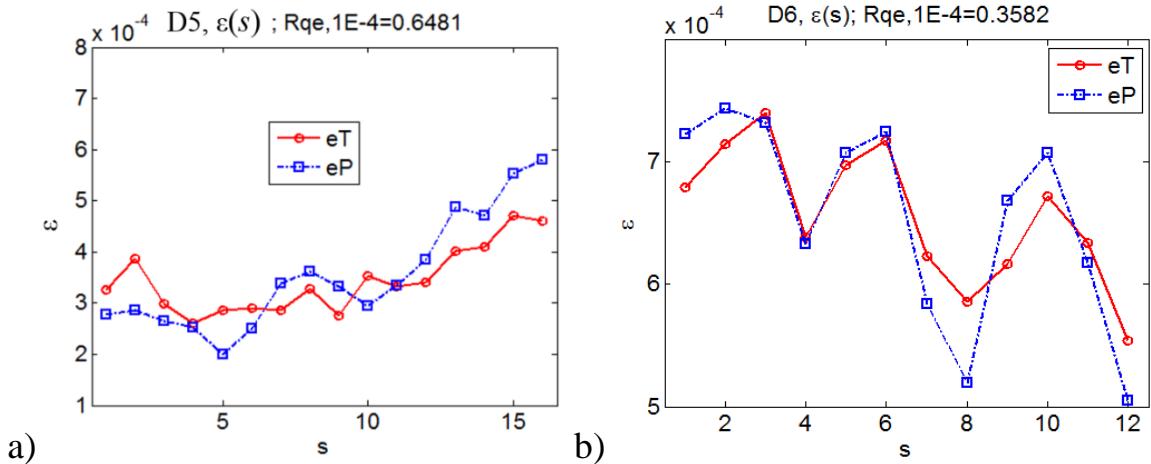


Figure 2. Values of average strains ε_P , calculated on the basis of Kikuchi band profiles, and strains ε_T , calculated on the basis of the energy Fourier spectrum for sample D5 (a), D6 (b).

Satisfactory agreement between ε_P and ε_T values was established, which indicates the correctness of the proposed methods for determining deformations (figure 2). The developed model was successfully applied for quantitative analysis of deformation parameters of synthetic diamond crystals. The proposed model can be a valuable tool for monitoring technological processes and predicting electrical and optical properties during the study of crystals.

- [1]. Fodchuk I., Solodkyi M., Balovskyak S., Borcha M., Hutsuliak I., Kuzmin A., Okolita M., Tkach O. Local distribution of strains in synthetic diamond crystals determined by the energy spectrum normalized parameters / [Proceedings of SPIE – 2024. – 12938 \(129382F\)](#).

Acknowledgments

This work was partially supported by Ministry of Education and Science of Ukraine (grant number 0125U000832, authors M. Solodkyi, A. Kuzmin and L. Drutsul; grant number 0125U001483, authors M. Borcha, S. Balovskyak, I. Hutsuliak).

Mn⁴⁺ red emission in MgAl₂O₄ spinel co-doped with manganese and TiO₂

L. Borkovska¹, K. Kozoriz¹, I. Vorona¹, A. Sidnev¹, Ye. Smortsova², L. Khomenkova¹

¹V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of NAS of Ukraine, 45 Pr. Nauky, Kyiv, 03028, Ukraine

²Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY, Notkestr. 85, Hamburg, 22607, Germany

Red phosphors pumped by blue light are necessary to achieve a high color rendering index and a low correlated color temperature of phosphor-converted white light-emitting diodes (LEDs). Mn⁴⁺ activated oxide materials show such benefits as high stability, low cost and environmental safety. Mn⁴⁺ emission in MgAl₂O₄ spinel is peaked at 651 nm that is the shortest wavelength among Mn-doped oxides and makes this material applicable for red phosphor in LEDs. However, its luminous efficacy needs to be increased.

In this work, the influence of TiO₂ co-doping on photoluminescence (PL) of Mn⁴⁺ activated MgAl₂O₄ has been investigated. The luminescent ceramics was fabricated by a solid-phase reaction at 1100-1400°C in the air using MgO, TiO₂ and Al₂O₃ powders as well as an aqueous solution of MnSO₄ as starting reagents. The TiO₂ content was taken in the amount necessary to replace a half of Al site ions with Ti atoms to form solid solutions, and MnSO₄ amount was such as to provide 0.1 mol.% of Mn in the phosphor.

The electron paramagnetic resonance (EPR) spectrum of MgAl₂O₄:Mn ceramics (Fig.1a) reveals the signals of Mn²⁺ ions in the MgO and MgAl₂O₄ crystal phases, while the TiO₂ co-doped ceramics shows the EPR signal of Mn²⁺ in the MgO host only. No EPR signal that can be ascribed to Mn⁴⁺ in the spinel phase was detected.

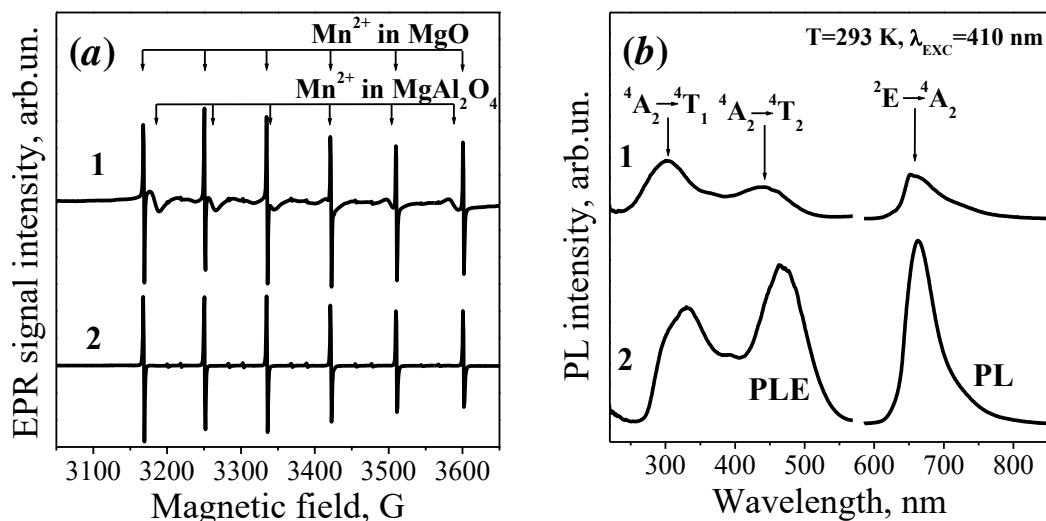


Fig.1. EPR (a) and room temperature PL and PL excitation spectra (b) of MgAl₂O₄:Mn (1) and Mg(Al,Ti)₂O₄:Mn (2) ceramics sintered at 1200°C (a) and 1400°C (b). The EPR spectra are normalized on the weight of ceramics.

Mn^{4+} photoluminescence and PL excitation (PLE) spectra of the ceramics of both types are shown in Fig.1b. In TiO_2 co-doped phosphor, the PL and PLE bands caused by optical transitions in Mn^{4+} are shifted to the red, and PL band is peaked at about 663 nm. Besides, the TiO_2 co-doped ceramics show in 4-10 times higher intensity of Mn^{4+} PL than MgAl_2O_4 (Fig.1b). In the diffuse reflectance spectra, it also demonstrate higher intensity of the absorption due to optical transitions in Mn^{4+} . This indicates higher concentration of Mn^{4+} ions in TiO_2 co-doped phosphor. The low temperature PL spectra ($T=9\text{ K}$) excited via Mn^{4+} intraband transitions ($\lambda_{\text{EXC}}=300\text{ nm}$) demonstrate the same tendency (Fig.2a).

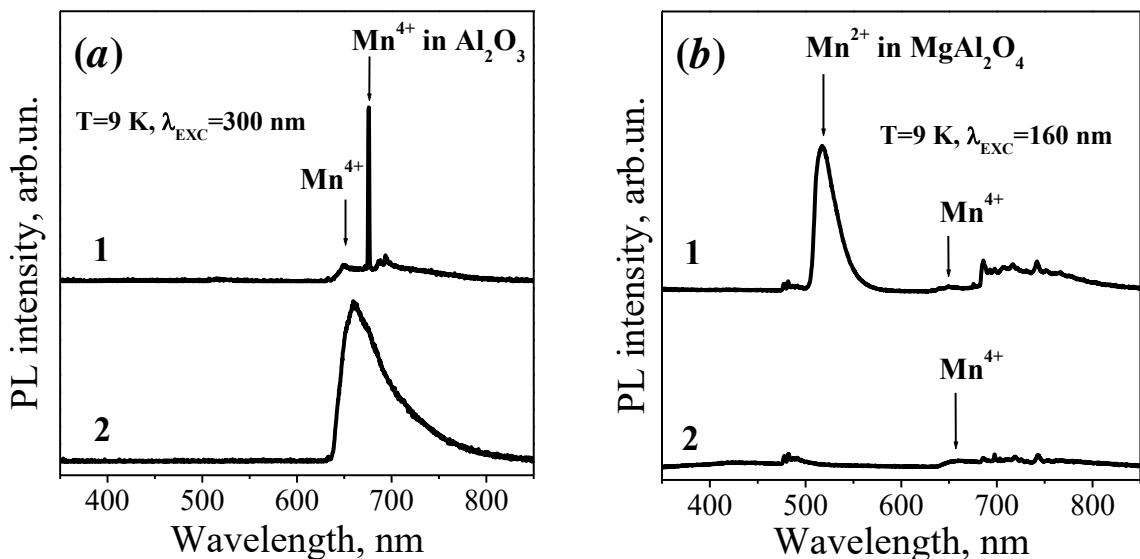


Fig.2. Low temperature PL spectra under 300 nm (a) and 160 nm (b) excitation of $\text{MgAl}_2\text{O}_4:\text{Mn}$ (1) and $\text{Mg}(\text{Al},\text{Ti})_2\text{O}_4:\text{Mn}$ (2) sintered at 1200°C .

In the low temperature PL spectra excited via band-to-band transitions of the spinel host ($\lambda_{\text{EXC}}=160\text{ nm}$), intensity of Mn^{4+} PL is low for the ceramics of both types (Fig.2b). Besides, the MgAl_2O_4 showed intense PL band at 520 nm caused by ${}^4\text{T}_1 \rightarrow {}^6\text{A}_1$ transitions of Mn^{2+} substituted Mg^{2+} site in tetrahedral position. This PL band is not observed in TiO_2 co-doped ceramics. The results agree well with the EPR study.

It is concluded that TiO_2 co-doping suppresses substitution of Mg site by Mn^{2+} and promotes incorporation of Mn^{4+} on Al(Ti) site. Thus, solid solution of magnesium titanate-aluminate can be used as a promising host for Mn^{4+} to produce highly luminescent red phosphor.

Acknowledgements. This work was supported by the National Academy of Sciences of Ukraine. The authors acknowledge also DESY (Hamburg, Germany) for the provision of experimental facilities at PETRA III Beamline P66 (proposal I-20240812 EC) as well as DESY User Office for financial support via NEPHEWS project funded by the HORIZON-Europe program.

Дефектна структура високоомних монокристалів CdTe:Cl методом повної інтегральної відбивної здатності

І.М. Фодчук, А.Р. Кузьмін, І.І. Гуцуляк, М.С. Солодкий, В.В. Довганюк,
Р.А. Заплітний, Д.С. Макотяк, Т.А. Каземірський
Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
бул. Коцюбинського, 2, Чернівці, Україна, 58002

У роботі використано метод повної інтегральної відбивної здатності (ПІВЗ) який розроблений В. Б. Молодкіним на основі динамічної теорії для діагностики складної дефектної структури [1]. Даний метод дає можливість оцінити концентрації та розмірів різних типів мікродефектів.

Об'єктами дослідження є серія зразків (111) кристалічних з'єднань CdTe, фірми Acrorad Co., Ltd, вирощених методом рухомого нагрівача, розмірами $5 \times 5 \times 0.5$ мм³. Експериментальні дослідження проводилися на дифрактометрі Panalytical Philips X'Pert PRO.

Нами розглянуто дві комбінації різних типів дефектів, а саме:

1) дископодібні кластери – відносно крупні зерна CdTe, які оточені дислокаційними петлями відповідних розмірів та дрібні сферичні кластери – дрібні зерна CdTe, у проміжках між крупними зернами.

2) дископодібні кластери – відносно крупні зерна CdTe, дислокаційні петлі.

Зокрема, для всіх зразків концентрація дислокаційних петель (рис. 1а) по відношенню до контрольного зразка різко спадає від поверхні до глибини ~ 9 мкм, а після зростає. Спад концентрації на глибині 9 мкм пов'язаний з можливим впорядкуванням структури з подальшим її розупорядкуванням в глибину кристалу. Це підтверджується одноманітністю розмірів дислокаційних петель для даної глибини екстинкції у зразках №2 та №3. Для зразка №4 характерним є майже монотонний хід залежності R(Λ) (рис. 1б).

Таблиця 1. Значення концентрацій (C) та розмірів (R)
дислокаційних петель від порядку відбивання

Зразок №	Рефлекс	111	333	444
2	C, см ⁻³	$5,3 \cdot 10^{11}$	$8,5 \cdot 10^8$	$2,1 \cdot 10^{11}$
3		$2,7 \cdot 10^{14}$	$2,9 \cdot 10^8$	$7,2 \cdot 10^{11}$
4		$1,5 \cdot 10^{12}$	$7,3 \cdot 10^7$	$5,6 \cdot 10^{11}$
2	R, см	$8,7 \cdot 10^{-4}$	$1,3 \cdot 10^{-6}$	$2,6 \cdot 10^{-5}$
3		$1,8 \cdot 10^{-3}$	$1,3 \cdot 10^{-6}$	$1,6 \cdot 10^{-6}$
4		$6,7 \cdot 10^{-6}$	$1,1 \cdot 10^{-5}$	$3,8 \cdot 10^{-5}$

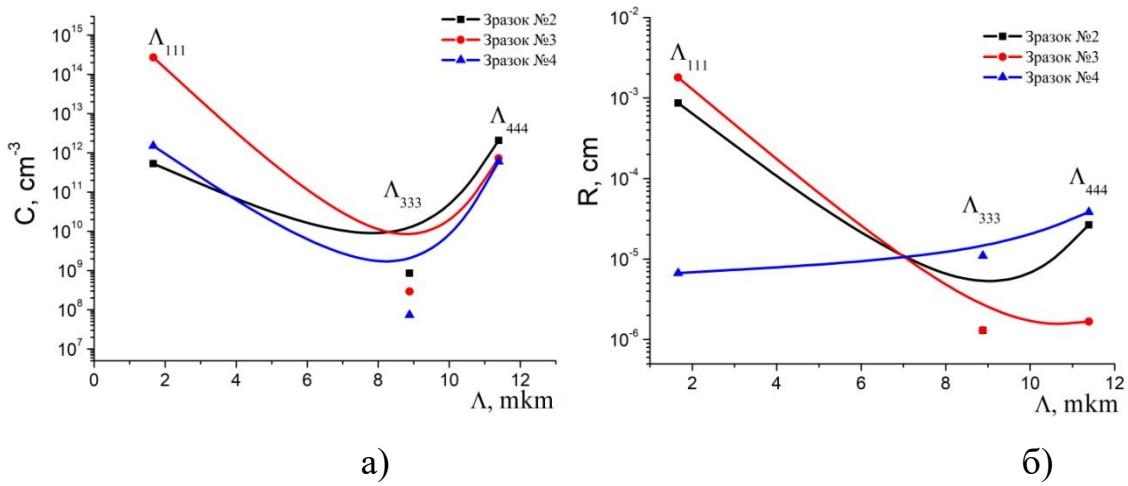


Рис.1. Залежність концентрацій С (а) та розмірів R (б) дислокаційних петель від порядку відбивання.

Найкращий результат отримано для першої моделі із трьох типів домінуючих дефектів: дископодібні кластери – відносно крупні зерна CdTe, які оточені дислокаційними петлями відповідних розмірів та дрібні сферичні кластери – дрібні зерна CdTe, у проміжках між крупними зернами. Це дало змогу визначити характеристики домінуючих дефектів (концентрацію та розміри) у кристалах (таблиця 1).

Список використаних джерел:

1. Molodkin, V.B., Nizkova, A.I., Olikhovs'ky, S.J at all, *Metallofizika i Noveishie Tekhnologii*, 2003, 25 (1), pp. 107-116. <https://www.scopus.com/record/display.uri?eid=2-s2.0-0344198058&origin=recordpage>

Подяки

Робота виконана за часткової підтримки Міністерства освіти і науки України (грант № 0125U000832, авт. А.Р. Кузьмін, М.С. Солодкий; грант № 0125U001483, авт. І.М. Фодчук, І.І. Гуцуляк, В.В. Довганюк, Р.А. Заплітний).

Оптична спектроскопія монокристалічних кремнієвих нанониток

П.О. Генцарь, М.А. Міняйло, Д.В. Пекур, Л.А. Демчина, М.В. Вуйчик, Ю.П. Кияк,
О.І. Власенко

Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України,
03028, м. Київ, пр. Науки 41, e-mail: rastneg@isp.kiev.ua

Перспективним матеріалом для сучасної мікро - і наноелектроніки є монокристалічні кремнієві нанонитки. Метою даної роботи є дослідження оптичних спектрів відбивання та пропускання в спектральному діапазоні $(0,2 \div 25) \cdot 10^{-6}$ м монокристалічних кремнієвих нанониток різної висоти для отримання даних про енергетичну зонну структуру. На поверхні монокристалічної кремнієвої пластини (100) - орієнтованого кремнію p^+ -типу (товщиною 510 ± 20 мкм та питомим опором $0,01 \Omega \cdot \text{см}$) вирощені монокристалічні кремнієві нанонитки (NWs). Виготовлені зразки монокристалічних кремнієвих нанониток мали пористість 60%. Довжина монокристалічних кремнієвих нанониток l_{NW} була 5,5 мкм; 20 мкм; 50 мкм. Оксидним покриттям поверхні кремнію є аморфна плівка товщина якої коливається в границях 0,5 нм – 7 нм. Товщина переходного шару SiO_x між монокристалом кремнію та двоокисом кремнію складає 0,6 нм. Оскільки коефіцієнт відбивання R , як функція від довжини електромагнітної хвилі λ $R = f(\lambda)$ пов'язаний із коефіцієнтом пропускання $T = f(\lambda)$ та поглинанням $D = f(\lambda)$ співвідношенням $R(\lambda) + T(\lambda) + D(\lambda) = 1$, то в даній роботі досліджувалися також спектри поглинання $D(\lambda) = 1 - [R(\lambda) + T(\lambda)]$. Виходячи з принципу невизначеності Гейзенберга для енергії E і часу t ($\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$) релаксаційні ефекти в поглинанні електромагнітних хвиль кристалом описують параметром уширення $\Gamma = \hbar/\tau$ (ущирення електронного переходу E_0 пов'язане з часом життя вільних носіїв заряду через взаємодію їх з коливаннями кристалічної гратки, домішками, дефектами в тому числі і поверхневого характеру), де τ – час енергетичної релаксації фотогенерованих носіїв заряду. В спектрах оптичного відбивання кремнієвих нанониток в спектральному діапазоні довжин хвиль 200 нм \div 1700 нм спостерігаються два енергетичні піки при енергіях 0,862 еВ і 1,046 еВ, а в спектрах оптичного пропускання енергетичні піки проявилися при енергіях 0,854 еВ та 1,048 еВ. Із оптичних спектрів відбивання та пропускання для кремнієвих нанониток із даними довжинами визначено енергетичне уширення оптичних спектрів матеріалів, що дорівнює 0,184 еВ та час енергетичної релаксації фотогенерованих носіїв заряду τ , який дорівнює $3,577 \cdot 10^{-15}$ с. Експериментальні дані та розрахунки вказують на зміну енергетичної зонної структури монокристалічних кремнієвих нанониток,

в порівнянні із монокристалом p-Si (100), що може бути пояснено квантоворозмірним ефектом, який виникає в досліджуваних об'єктах.

Коли розміри напівпровідникового кристалу (плівки) зменшуються до величини співмірної із довжиною хвилі де-Бройля вільних носіїв заряду (електронів і дірок), то необхідно враховувати вплив обмеження руху носіїв заряду на електронні і оптичні явища досліджуваного матеріалу. Даний розмірний ефект називається квантовим розмірним ефектом, оскільки зміна властивостей функціональних матеріалів електронної техніки має квантово-механічну природу. Так, квазічастинка яка рухається, зокрема електрон в кристалі є одночасно і хвилею (хвиля де-Бройля) довжина якої дорівнює $\lambda_e = \frac{h}{p_e}$, де p_e – імпульс (квазіімпульс) частинки (електрона в кристалі).

Для більшості твердих тіл величина електронної хвилі λ_e розміщена в діапазоні 1 нм \div 100 нм. В напівпровідниках значення електронної хвилі де-Бройля розміщене в діапазоні 1 нм \div 10 нм. Якщо розміри, які дають інформацію про досліджуваний кристал співмірні із довжиною λ_e , то внаслідок відбивання хвилі де-Бройля від границь напівпровідника виникає додаткова хвиля.

Із збільшенням довжини кремнієвих нанониток коефіцієнт оптичного відбивання R в спектральному діапазоні довжин хвиль 0,2 мкм – 1,8 мкм зростає а оптичне пропускання Т даного матеріалу зменшується. При збільшенні енергії електромагнітного випромінювання поглинання кремнієвих нанониток довжиною $l_{NW} = 5,5$ мкм зростає до максимального значення при довжині електромагнітної хвилі $5 \cdot 10^{-6}$ м. В той же час поглинання кремнієвих нанониток довжиною $l_{NW} = 20$ мкм, довжиною $l_{NW} = 50$ мкм при збільшенні енергії електромагнітного випромінювання зростає не так суттєво.

На основі викладених експериментальних результатів по дослідженю оптичних спектрів відбивання та пропускання в спектральному діапазоні $(0,2 \div 25) \cdot 10^{-6}$ м монокристалічних кремнієвих нанониток з довжинами $l_{NW} = 5,5$ мкм; $l_{NW} = 20$ мкм; $l_{NW} = 50$ мкм і пористістю експериментальних зразків – 60 % зроблено наступні висновки: показано зміну параметрів енергетичної зонної структури монокристалічних кремнієвих нанониток, в порівнянні із монокристалом p-Si (100); експериментальні результати та розрахунки пояснено квантоворозмірним ефектом, який виникає в досліджуваних об'єктах; побудовано та проаналізовано спектри оптичного поглинання кремнієвих нанониток; оцінено енергетичне уширення ΔE оптичних спектрів та час енергетичної релаксації фотогенерованих вільних носіїв заряду τ досліджуваних матеріалів.

Підвищення ефективності зонної очистки зруйнованих елементів оптичного германію

Маланич Г.П., Пекар Г.С., Сингайський О.Ф., Томашик В.М., Локшин М.М.

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України,

пр. Науки 41, м. Київ, Україна, 03028, e-mail: galya.malanich@gmail.com

Джерелом для вирощування кристалів оптичного германію, з яких в подальшому виготовляють оптичні елементи для інфрачервоної техніки, є германій полікристалічний зонноочищений, чистотою не менше за 6N. Для одержання такого матеріалу зі зруйнованих оптичних германієвих елементів та відходів їх виробництва, які становлять до 60, а іноді і більше відсотків ваги германієвих заготовок, було обґрунтовано та запропоновано оригінальний метод очистки. Запропонований нами спосіб не передбачає застосування методів хіміко-металургійної очистки з використанням ректифікаційних технологій, що дозволяє значно зменшити терміни переробки, а також вартість одержання германію полікристалічного зонноочищеного [1].

При розробці цього способу ми виходили з того, що в зруйнованих оптичних елементах та відходах їх виробництва не містяться домішки бору та миш'яку, а наявні лише легуючі донорні домішки сурми, літію або натрію, які забезпечують прозорість кристалів германію в діапазоні 2 – 11 мкм, залишків матеріалу антивідбиваючих покрівель, а також неконтрольовані домішки різної хімічної природи, які впроваджуються до складу кристалів в процесі їх вирощування.

Вихідний попередньо очищений від металічних і органічних забруднень та залишків матеріалу антивідбиваючих покрівель германій вагою ~ 2 кг подрібнювали до розмірів 0,2 – 0,7 см³, завантажували у спеціальні графітові човники довжиною 50 см та розміщували в установці для зонної плавки, яка була заживлена від генератора потужністю 50 кВт частотою 460 кГц. Човник розміщували в кварцовому контейнері в потоці водню, напрямок якого співпадав з напрямком руху розплавленої зони, і протягували всередині трьох послідовних індукційних нагрівачів, контролюючи формування трьох розплавлених зон зі швидкістю 3 мм/хв.

На відміну від розповсюджених способів зонного очищення германію, запропоновано проправлювати поверхню германієвих злитків після кожного проходу розплавлених зон, що дозволило суттєво підвищити ефективність зонної очистки. При проходженні розплавленої зони вздовж злитку германію сторонні домішки відтісняються у розплав на фронті кристалізації і частково на поверхню злитку. Сторонні домішки, які знаходяться на поверхні злитку, розчиняли спеціально розробленим хімічним травником.

На рис. 1 наведено розподіл величини питомого електричного опору по довжині злитку германію після трьох проходів розплавленої зони. Крива 1 – без проміжного травлення, крива 2 – з проміжним травленням у травнику на основі соляної кислоти, крива 3 – з проміжним травленням у травнику за розробленою нами рецептурою.

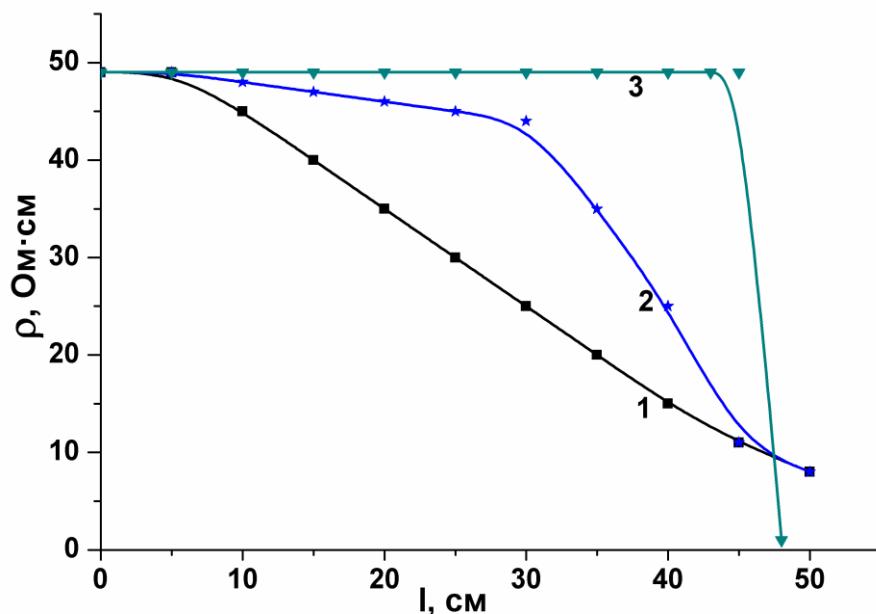


Рис. 1. Розподіл величини питомого електричного опору вздовж злитку германію після трьох проходів розплавленої зони. 1 – без проміжного травлення, 2 – з проміжним травленням у травнику $H_2O_2 + HCl + H_2O$, 3 – з проміжним травленням у травнику за розробленою нами рецептурою.

Отримані результати свідчать про те, що травлення поверхні злитку після кожного проходу розплавленої зони дозволяє суттєво підвищити ефективність процесу зонного очищення, а застосування травника за розробленою нами рецептурою – значно збільшити кількість очищеного матеріалу чистотою 6N.

Очищений матеріал є готовою сировиною для вирощування високоякісних кристалів оптичного германію.

Робота виконана за підтримки проєкту НФДУ № 2023.04/0010 “Розробка технології відновлення германієвих оптичних елементів приладів теплобачення для ремонту бронетанкової та авіаційної техніки”. Автори щиро вдячні всім захисникам України та рятівникам, завдяки яким стало можливим проведення досліджень та публікація їх результатів.

1. Transistor Technology. Princeton, N.J: / Ed. by H.E. Bridgers, J.H. Scuff, J.N. Shive, and F.J. Biondi. London: D. van Nostrand Co., 1958.

Features of dynamic magnetic susceptibility of semimagnetic $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ solid solutions

V. E. Slyntko¹, L. Kilanski², M. Arciszewska², V. I. Ivanov¹, M. V. Tovarnytskyi¹
¹*Chernivtsi Branch of Frantsevych Institute for Problems of Materials Science, NASU,
 Iryny Vilde 5, Chernivtsi, 58001, Ukraine*

²*Institute of Physics, Polish Academy of Sciences,
 Aleja Lotników 32/46, PL-02668 Warsaw, Poland*

Double-humped temperature dependences of the dynamic magnetic susceptibility $\chi_{AC}(T)$ of our GeTe samples doped with magnetic impurities were observed initially by Dr. Monika Arciszewska in 2005 (Fig. 1a).

The shape of the curves looked unusual compared to that observed previously. Later we registered it in several other $A^{IV}B^{VI}$ based compounds of semimagnetic semiconductors [1], until recently a large series of double-humped curves was obtained on our $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ samples. This finally convinced us of the non-random nature of this feature.

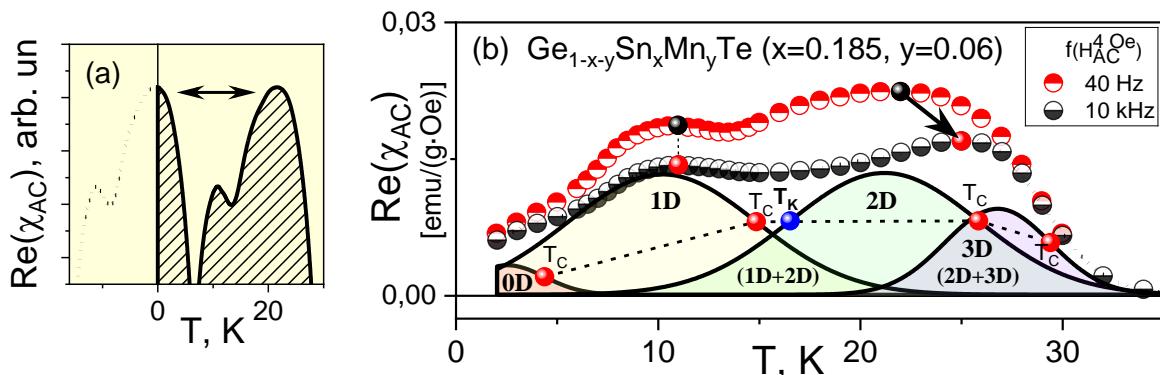


Fig. 1 – a) different observed forms of the $\text{Re}(\chi_{AC})(T)$ dependences;
 b) dynamic cluster magnetic subsystems in $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Mn}_y\text{Te}$

In the general case, the shape of the $\chi_{AC}(T)$ curves is determined by two main factors: I. internal (chemical composition, type and molar content of impurities, deviations from stoichiometry, defects, etc.), and II. external (in our case, the amplitude and frequency of the external magnetic field H_{AC}). In the $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ ($0.16 \leq x \leq 0.84$; $0.003 \leq y \leq 0.086$) solid solutions we observed $\chi_{AC}(T)$ curves of different shapes, until we noticed that all of them are *fragments of the original two-humped curve* (Fig. 1a).

Indeed, if we fix such a curve relative to the ordinate axis χ_{AC} , and then begin shifting it to the left along the axis T (so that part of the curve dips into the region of imaginary temperatures $T < 0$ K), then in the region $T > 0$ K we will consistently obtain *all possible shapes* of the experimental curves $\text{Re}(\chi_{AC})(T)$ observed in our $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ samples (Fig. 1a). In its most truncated form, the two-humped $\text{Re}(\chi_{AC})(T)$ curve has the shape typical for a paramagnet followed by a shape for a ferromagnet (FM) and so on.

This approach based on the shape control of the experimental $\text{Re}(\chi_{\text{AC}})(T)$ curves allows easy determining the type of *dynamic magnetic clusters* (DMC) participating in the RKKY (Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida) exchange interaction in each specific case. Gaussian curves fitting of the experimental $\text{Re}(\chi_{\text{AC}})(T)$ dependences revealed four DMC types of different dimensions (0D, 1D, 2D, 3D) arising due to *thermal vibrations* of the crystal lattice (Fig. 1b). Each of these DMC subsystems has its own set of critical temperatures, the most famous of which is the Curie temperature (T_C) marked with red circles at the inflection points on the right wings of the Gaussian curves (Fig. 1b). The top of each Gaussian curve corresponds to the maximal magnetization $M=\chi \cdot H$ of the magnetic subsystem and its greatest magnetic ordering. Two paths lead from the top toward magnetic disordering. One passes through the *Curie temperature* (T_C) and leads to the paramagnetic phase (PM). The other passes through the *Kilanski temperature* (T_K) and leads to a maximally disordered state of the spin glass (SG) or cluster glass (CG).

The areas under the Gaussian curves form cross sections that correspond to different mixtures of the mentioned magnetic phases: (SG+FM), (CG+FM), (SG+CG+FM). The canonical spin glass, which represents the stochastic scattering of single magnetic ions in a non-magnetic matrix, corresponds to zero-dimensional (0D) degenerate magnetic clusters.

When the frequency f of the external magnetic field H_{AC} increases from 40 Hz to 10 kHz, the right peak on the $\text{Re}(\chi_{\text{AC}})(T)$ dependence shifts by 3.01 K to the right, while the left peak remains almost moveless ($\Delta T=0.021$ K) (Fig. 1b). The amplitudes of both peaks in the specified frequency range decreases by approximately 30%. The shift $\Delta T=T_{f_{\text{max}}}-T_{f_{\text{min}}}$ of the frequency-dependent right peak of the $\text{Re}(\chi_{\text{AC}})(T)$ dependence is included in the well-known expression for *Mydosh parameter* (R) [2]:

$$R = \frac{T_{f_{\text{max}}} - T_{f_{\text{min}}}}{T_{f_{\text{max}}} \times \log_{10} \frac{f_{\text{max}}}{f_{\text{min}}}} \quad (1)$$

The Mydosh parameter is used to identify the magnetic phases: $0.005 < R < 0.01$ (spin glass); $0.01 \leq R \leq 0.02$ (spin glass-like state); $0.02 < R < 0.06$ (cluster glass); $R > 0.13$ (superparamagnetic state). However, taking into account what was said above about mixtures of magnetic phases in semimagnetic compounds, it is obvious that the Mydosh parameter is not enough for their detailed description. The latter requires data about the number of active (at $T > 0$ K) dynamic cluster magnetic subsystems (Fig. 1a) and their critical temperatures.

- [1] A. Podgórní et al. Magnetic properties of $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Pb}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ cluster-glass system // JALCOM. – 2015. – V. 649. – P. 142-150. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.06.208>.
- [2] G. Benka et al. Interplay of itinerant magnetism and spin-glass behavior in $\text{Fe}_x\text{Cr}_{1-x}$ // Phys. Rev. Mat. 6, 044407 (2022) <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.6.044407>.

Nanoscale inclusions of ferromagnetic metals in synthetic HPHT diamonds

V. Bratus¹, B. Shanina¹, I. Vorona¹, V. Golub², V. Lysakovskiy³, S. Ivakhnenko³, G. Kakazei⁴

¹*V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine,
45, Nauky Avenue, 03028 Kyiv, Ukraine*

²*Institute of Magnetism NAS of Ukraine and MES of Ukraine,
36-b, Akad. Vernadskogo blvd., 03142 Kyiv, Ukraine*

³*V. Bakul Institute for Superhard Materials, NAS of Ukraine,
2, Avtozavodska Street, 04074 Kyiv, Ukraine*

⁴*Institute of Physics for Advanced Materials, Nanotechnology and Photonics, University of
Porto,
Praça Gomes Teixeira, 4099-002, Porto, Portugal*

In order to achieve diamond synthesis in the laboratory, high pressure and high temperature (HPHT) conditions are needed. In addition to them, the production of synthetic diamond requires the introduction of ferromagnetic solvent-catalysts into the reaction mixture with the result that relatively large amounts of the metal remain as impurities and agglomerates into nano-clusters and microinclusions in the finished product. For this reason, the overwhelming majority of synthetic diamonds are ferromagnetic. So, along with structural defects, the ferromagnetic inclusions hold significance in understanding the HPHT-diamonds attributes. This presentation is focused on the electron paramagnetic resonance (EPR) and ferromagnetic resonance (FMR) traits of domestic HPHT-diamonds.

Diamond single crystals were mainly grown in solution-melt systems based on Fe-Co doped with Ti, Zr and Mg or Fe-Ni catalysts. This makes it possible to obtain type *Ib* and *IIa* diamond single crystals 5-15 carats in size with a controlled defect-impurity composition. Magnetic resonance (MR) measurements were carried out in the temperature range of 100-300K using X-band EPR spectrometers operating at 9.44GHz. A modulation field of 6 G and a frequency of 100 kHz were applied. The first derivative of the power adsorption was detected as a function of applied field, and the field range was 0-7000 G.

Multifarious magnetic resonance spectra have been registered depending on type of metal catalysts and dopants. Typical MR spectra for distinct types of HPHT-diamond are shown in Fig. 1. In the general case, there is a distinct wide line in low magnetic field and several less intense lines in higher field. To elucidate their origin the angular and temperature dependences were experimentally examined in detail. As a rule, the experimental spectra were simulated by a set of Lorentzian functions to find the angular dependence of the resonance fields for each signal and sample. A gigantic shift of one FMR spectrum to lower magnetic field with temperature increase was revealed. It

was attributed to Villari effect owing to considerable distinctions between thermal expansion coefficients for diamond ($1,0 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ @300K) and metal inclusions ($12,0 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ @300K for iron).

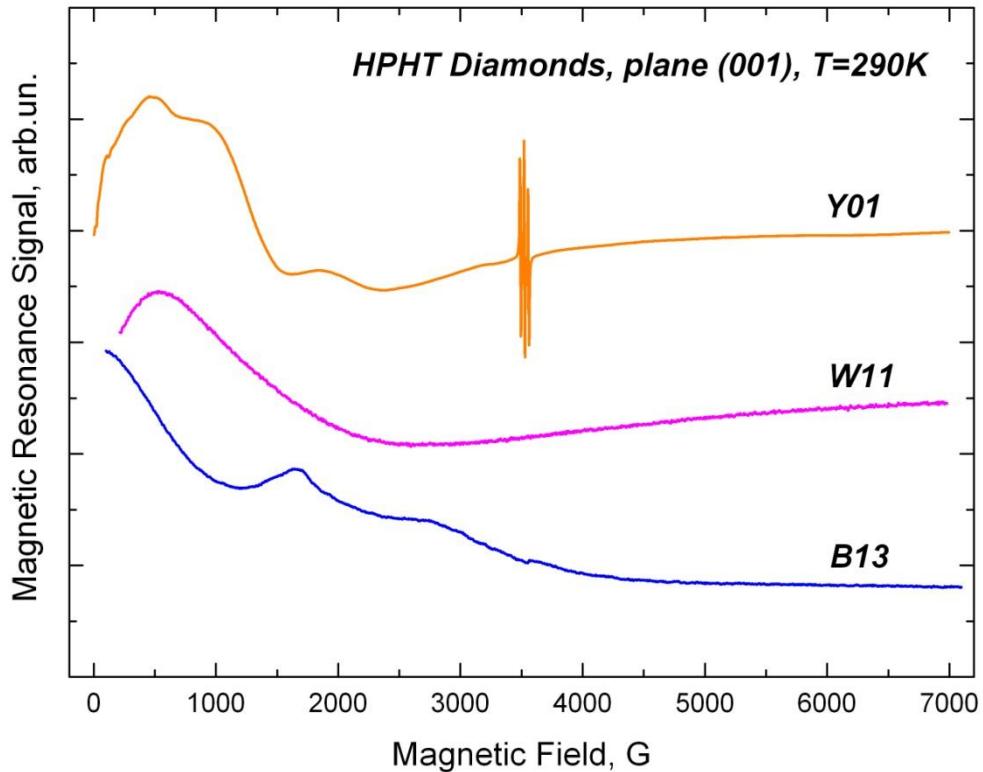


Fig. 1. Magnetic resonance spectra of synthetic diamonds: yellow with brown tint undoped crystal Y01 (type *Ib*), moderately boron-doped colorless white W11 (type *IIa*) and intensively boron-doped blue-gray crystal B13 (type *IIb*). Narrow lines of the sample Y01 in the range of 3550 G belong to the EPR spectrum of the nitrogen impurity.

For Ib diamonds, a comparison of the position and width of the EPR lines in the spectra of N-impurity for HPHT crystals with a low and high concentration of FM inclusions makes it possible to determine their influence on local magnetic fields.

The theoretical analysis and simulation of experimental spectra made possible to determine magnetic characteristics of the FM inclusions in all the samples studied. The intense low-field part was attributed to lines of superparamagnetic resonance, while other lines were assigned to FMR. According to the nature of superparamagnetism, it is built up by an ensemble of weakly interacting single-domain magnetic particles. It clearly demonstrates that there are clouds of invisible nanoscale ferromagnetic metal inclusions in the bulk of HPHT crystals. In addition, the shape of magnetic particles was estimated and it was established that they have mainly cubic shape.

The study was supported in part by IEEE “Magnetism in Ukraine 2022/2023 initiative” project.

Особливості безмаскового лазерного запису графічних зображень на тонких металевих плівках

Ю.І. Чегіль¹, О.М.Буток¹, Д.Ю.Манько¹, Є.Є. Антонов¹, В.М. Джаган²,
Корчовий А.А.².

Інститут проблем реєстрації інформації НАН України, 03113, Київ, вул.
Шпака, 2.

Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України. 03028,
Київ, просп. Науки, 41

У безмасковій літографії широко застосовується технологія прямого лазерного запису на шарах фоторезистів з подальшою селективною обробкою. Перевагою цього способу є висока роздільна здатність, що дозволяє формувати елементи субмікронних розмірів. Процес створення зображень на основі фоторезистів є багатоступеневим і потребує високої чистоти при операціях селективного хімічного травлення. Для формування металевих зображень з елементами розміром у десятки мікрометрів ефективним є процес лазерної ablації металевих плівок короткими імпульсами сфокусованого лазерного випромінювання. При обробці металевих плівок перевага надається фемтосекундним імпульсам, які забезпечують високу роздільну здатність запису [1]. Було проведено дослідження запису зображень на плівках хрому товщиною 180–200 нм з оптичною щільністю 2,3–2,5 на довжині хвилі 1,06 мкм. Опромінення потужними лазерними імпульсами дозволяє формувати зображення без додаткової хімічної обробки підкладок. Зображення, отримані шляхом прямого випаровування хромових плівок сфокусованим випромінюванням IR-гравера Raycus 30W RA20, показано на рис. 1.

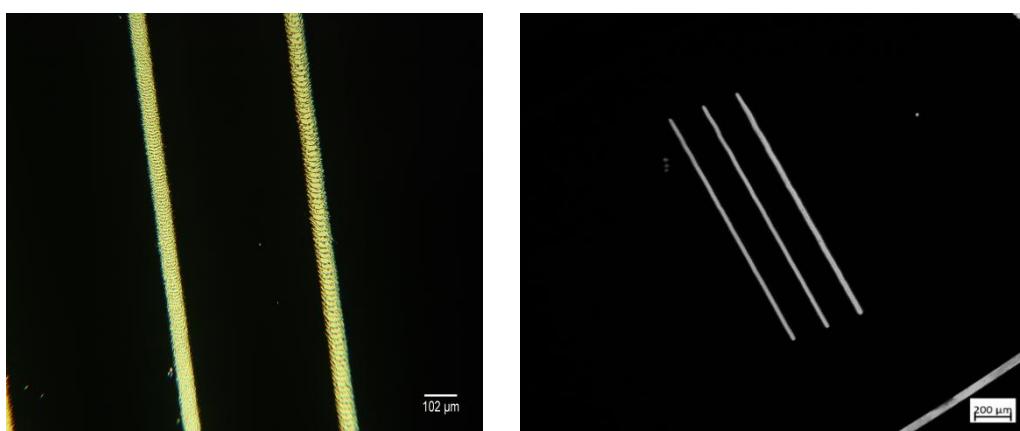


Рис.1.Зображення отримані прямим випаровуванням сфокусованим лазерним випромінюванням плівок хрому на IR гравері Raycus 30W RA20 .

Такий режим запису зображень вимагає точного вибору параметрів експонування. Перевищення потужності лазерного

випромінювання призводить до локальної деформації підкладки. Зображення, отримані внаслідок прямого випаровування плівок хрому сфокусованим лазерним випромінюванням на ІЧ-гравері Raycus 30W RA20 з пошкодженням поверхні підкладки, наведено на рис. 2.

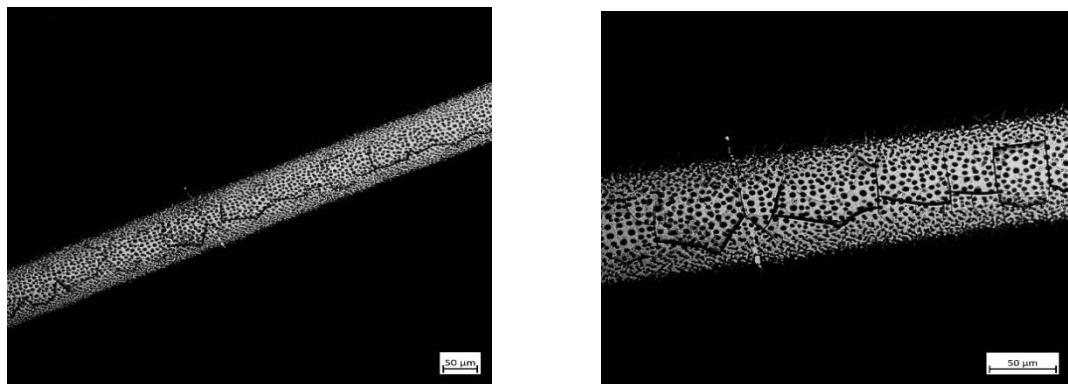


Рис.2.Зображення отримані прямим випаровуванням сфокусованим лазерним випромінюванням плівок хрому на ІР гравері Raycus 30W RA20 з руйнуванням поверхні підкладки .

Запис зображень здійснювався з частотою повторюваності імпульсів 40 кГц, потоком 95 Дж/см² з кроком по поверхні 8 мкм. Тривалість одного імпульса 150 нс. Точність фокусування лазера складала +/- 250 мкм. Такий спосіб прямого аблляційного запису зможе знайти реальні застосування при виготовленні лімбів та кодових дисків.

1. Продемонстровано, що опромінення тонких плівок тугоплавких металів потужними імпульсами лазерного випромінювання дає змогу формувати прецензійні графічні зображення без необхідності додаткової хімічної обробки підкладок, що спрощує технологічний процес.
2. Ефективне застосування режиму локальної аблляції металевих плівок потребує точних налаштувань оптичної системи з покращеним налаштуванням вибору параметрів експонування, доповненої набором лінійних оптических фільтрів і контролем температури та атмосфери для запобігання небажаних ушкоджень підкладки.

Дослідження виконані за підтримки Національного фонду досліджень України грант 2023.04/004, 2023.05/0022.

Raman and photoluminescence spectroscopy of laser-induced structural phase transition in polycrystalline VO₂

Danylenko I.M., Maziar D.M., Kolomys O.F., Strelchuk V.V., Dzhahan V.M., Dubikovskyi O.V.

V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine,
Prospect Nauky, 41, Kyiv-03028, Ukraine
E-mail: igor.tesV@gmail.com

Vanadium oxides (VO_x) constitute a class of transition metal oxides with diverse oxidation states (V²⁺ to V⁺⁵) and crystal structures, leading to unique electronic, optical, and catalytic properties and making them highly adaptable for a range of advanced technologies. Structural modifications in VO₂, including the formation of higher oxides such as V₆O₁₃ or V₂O₅, can be induced by laser thermal effects or ionizing high-energy radiation. In oxygen-rich environments, this process is further accelerated due to the interaction of activated oxygen species with radiation-induced defects in the crystal lattice.

In this study, we investigate laser-induced structural changes in vanadium oxide around the metal-insulator transition (MIT) as a function of laser irradiation power. The optical properties of the VO₂ films during the phase transition process were investigated using in-situ temperature- and excitation-dependent Raman and photoluminescence (PL) spectroscopy - a non-destructive and effective method for identifying and mapping their spatial distribution.

As clearly shown in Fig. 1, the vibrational bands of vanadium oxide exhibit spectral changes as a function of laser irradiation power. Well-defined intense narrow phonon bands of A_g and B_g symmetry of the monoclinic VO₂(M1) phase are observed in the Stokes and Anti-Stokes Raman spectra at low laser power excitation $\sim 10 \text{ MW/m}^2$, $\lambda_{\text{exc}} = 532 \text{ nm}$ (Fig. 1a).

As shown by the analysis of the intensity ratio of the vibrational bands in Stokes and anti-Stokes Raman spectra laser excitation power $\sim 25 \text{ MW/m}^2$ on the sample surface could cause instantaneous local heating up to more than 70°C. It is known that as the temperature increases to $T_c \approx 67 \text{ }^\circ\text{C}$, a metal-insulator transition occurs, resulting in a gradual decrease in the intensity of the Raman peaks corresponding to the monoclinic VO₂(M1) phase with their subsequent disappearance. At the same time, a broad bands corresponding to the tetragonal rutile VO₂(R) phase are registered in the Raman spectrum. This phenomenon mainly originates from the structural phase transition in VO₂ caused by the laser-induced accumulation of thermal effects.

Further increase in laser irradiation power above 50 MW/m² induces a gradual structural transformation from of VO₂(R) to V₂O₅ phase via the intermediate V₆O₁₃ phase due to the increase in temperature and interaction with an oxygen atmosphere.

The laser heating process induces a reaction between VO_2 and oxygen in the air: $4\text{VO}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{V}_2\text{O}_5$. This structural change is irreversible. The research indicates that laser irradiation of an oxide material can significantly influence deviations in oxygen stoichiometry. Laser irradiation of VO_2 promotes the gradual diffusion of oxygen from the air into the surface of thin films. The resulting V_xO_y thin film exhibits varying stoichiometries as the oxygen content increases.

In order to investigate the inter- and intraband transitions in V_2O_5 structure prepared using laser irradiation at a laser power density of 100 MW/m^2 , the PL spectra of the films were measured at temperatures from 78 to 438 K. The V_2O_5 PL spectra exhibit two bands at 2.0 eV and 1.8 eV caused by the interband transitions from the conduction band to the valence band and intraband transitions of oxygen vacancies, respectively. The position of the PL bands showed a strong dependence on temperature, with a gradual high-energy shift (from 1.94 and 1.82 at 78 K to 2.06 and 1.88 eV at 450 K, Fig. 1b), and a decrease in oxygen vacancies contribution with temperature, as evidenced by the redistribution of low- and high-energy band intensities. The presence of oxygen vacancies and structural defects (e.g., from phase transitions) can significantly enhance PL, particularly in the visible range. As the temperature increases, the contribution of defect-related emission decreases, indicating improved structural quality of the V_2O_5 film.

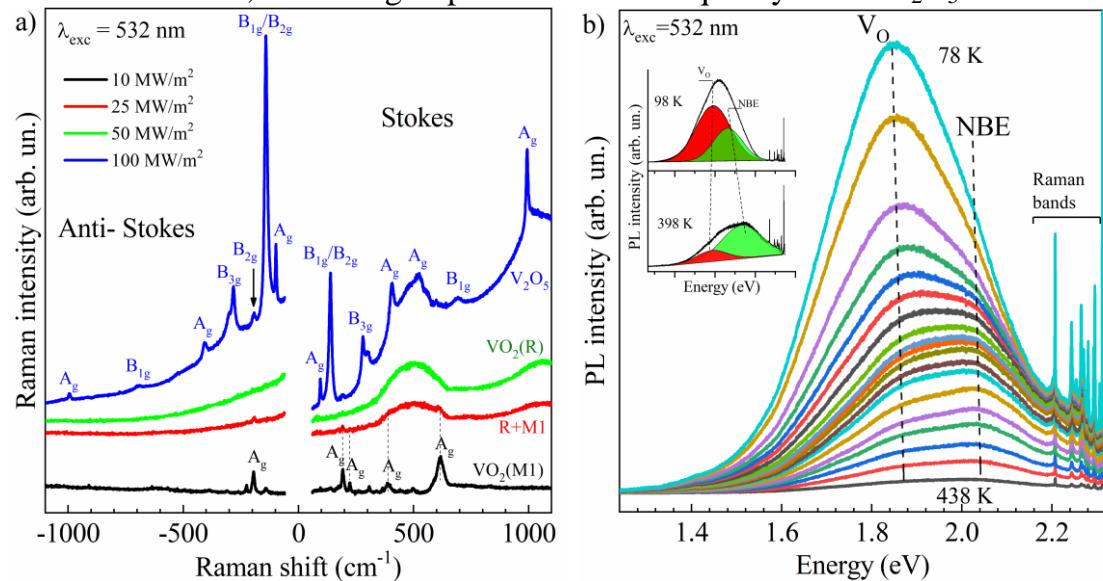


Figure 1. a) Stokes and anti-Stokes Raman spectra of VO_2 films at varied laser powers; b) Temperature-dependent PL spectra of VO_2 films. $\lambda_{\text{exc}} = 532 \text{ nm}$.

The obtained results enhance understanding of the physical properties of vanadium oxide and its structural and phase transformations, which is essential for further application in semiconductor devices. Using optical techniques to study changes in optical properties and phase transition mechanisms under laser irradiation of VO_2 films will be beneficial for the further development of phase transition materials.

The work was financially supported by National Research foundation, grant by NRFU project #2023.05/0022 by S.V.V., D.V.M. and grant # 2023.04/0026 for M.D.M., K.O.F. and grant №08/01-2025(6).

Self-interstitials-related radiation defects in Ge

A.V. Duvanskii, M. G. Sosnin, L. I. Khirunenko

*Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine,
Prospekt Nauki 46, 03028 Kiev, Ukraine*

The possibility of making devices which use the high charge carrier mobility of germanium in mainstream semiconductor technology has drawn attention to the very limited understanding of defect reactions between intrinsic defects, vacancies and self-interstitials, and impurities in this material. Some of these reactions are, however, keys in controlling many nano-scaling issues in technology of Ge-based electronic devices.

In contrast to silicon in Ge only a few radiation-induced defects have been identified unambiguously. The situation with reactions involving self-interstitial atoms (Ge_I) and oxygen is particularly unclear. One of the main reasons of such situation in Ge is related to the limited applicability of structure-sensitive techniques, like electron spin resonance, to defect studies in this material. Besides, overlapping of the reactions with participation of Ge_I and vacancies and simultaneous occurrence of several, usually multi-charged, vacancy- and Ge_I -related defects in irradiated Ge result in very complex DLTS and infrared absorption spectra. About 50 absorption lines and 17 DLTS peaks were observed for oxygen-rich Ge crystals irradiated with MeV electrons. To distinguish the processes involving vacancies (V) and self-interstitials the doping with tin was used in the work. Tin in Ge is known to be an efficient trap for vacancy and forms at low temperature irradiation the vacancy+tin (SnV) centers. The Sn-V complex in Ge is stable up to $T_{ann.} \approx 373$ K and it is possible to suppress interactions of vacancies with other impurities and, therefore, to observe in the absorption spectra only the lines associated with interstitial-related complexes. It should be noted that Ge self-interstitial becomes mobile only at temperatures above 180 K in Ge crystals.

In the present work, we have studied the Ge_I -related defects introduced by irradiation with 5 MeV electrons at 80 K into oxygen-doped germanium of different isotope composition. Samples of four types of n-type oxygen rich Ge were investigated: samples with natural abundance of isotopes ($Ge_{nat.}$), samples enriched with ^{74}Ge isotope or with ^{76}Ge isotope and natural Ge doped with Sn. A sample of oxygen lean Sn-doped Ge sample was also studied. $Ge_I O$ -related complexes were studied by means of infrared absorption spectroscopy.

Fig. 1 shows fragments of the absorption spectra for $Ge:Sn,O$ sample with the concentration of tin $N_{Sn} = 1.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ and for samples enriched with ^{74}Ge and ^{76}Ge isotopes. Three absorption lines were revealed in the spectra. As can be seen from Fig.1, along with the shift of lines there is a

significant decrease in their half-widths (H) occurs in isotopically enriched Ge.

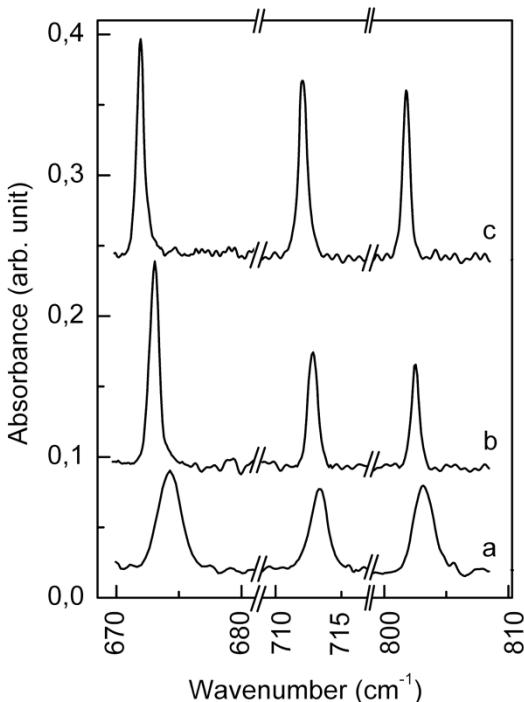


Fig. 1. Fragments of absorption spectra measured at 10 K for Ge:Sn with natural abundance (a), Ge enriched with 74 isotope (b), and Ge enriched with 76 isotope (c). The samples were subjected to irradiation at 80 K with electrons to a dose of $7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$, followed by isochronal annealing at 250 K.

The study of samples with different oxygen concentrations and oxygen lean Ge:Sn showed that oxygen is a component of the defect associated with all three detected lines, and the defect is interstitial-related. Positions and half-widths of the lines observed in the samples Ge:Sn (Ge nat.), ^{74}Ge and ^{76}Ge and their identification are given in Table 1.

Table 1. Absorption lines observed for Ge:Sn (Ge_{nat}), ^{74}Ge and ^{76}Ge ; the half-width and identification of lines.

Ge:Sn (Ge _{nat})		^{74}Ge		^{76}Ge		
Line, cm^{-1}	H, cm^{-1}	Line, cm^{-1}	H, cm^{-1}	Line, cm^{-1}	H, cm^{-1}	Identification
674.2	2.3	673.1	0.6	672.1	0.68	Ge_IO
713.3	1.8	712.7	0.58	711.65	0.7	$(\text{Ge}_I)_2\text{O}$
803.2	1.8	802.6	0.59	801.8	0.7	$(\text{Ge}_I)_2\text{O}$

Вплив мікрокремнезему та метакаоліну на термостійкість високоміцніх композитів

І.М. Фодчук, В.Ф. Романкевич, В.В Довганюк, Т.А. Каземірський, О.В. Сумарюк

Чернівецький національний університет імені Юрія Федъковича, вул.

Коцюбинського, 2, Чернівці, Україна, 58002

З огляду на тенденцію до впровадження ультрависокоміцніх бетонних композитів (УВМБ) у сучасне будівництво, зокрема в об'єктах інфраструктури та висотного будівництва, все більшої актуальності набуває питання їхньої поведінки при впливі високих температур. Зокрема, пожежі створюють умови локального перегріву матеріалу до 800–1000°C, що може привести до втрати несучої здатності конструкцій. У зв'язку з цим, дослідження жаро- та вогнестійкості УВМБ, модифікованих мікрокремнеземом і метакаоліном, є актуальним та важливим завданням.

У дослідженні виготовлено чотири серії зразків, включаючи контрольну без добавок і три варіанти з мікрокремнеземом (20, 25, 30%) та постійною частиною метакаоліну (5%). Бетонні куби розміром 100×100×100 мм тверднули 28 діб у стандартних умовах, після чого піддавались термічному впливу в муфельній печі (до 900°C). Досліджено зміну міцності на стиск, тріщиностійкість, масу та мікроструктуру.

Контрольні зразки мали початкову міцність 80 МПа, але після впливу температури до 900°C втрата міцності сягала 90%, що свідчить про катастрофічну деградацію C–S–Н фаз.

Зразки з мікрокремнеземом і метакаоліном демонстрували початкову міцність до 120 МПа, і вищу залишкову міцність після нагрівання до 400°C.

При температурах 200–300°C спостерігалось зростання міцності на 8–13% — ефект пояснюється внутрішнім автоклавуванням.

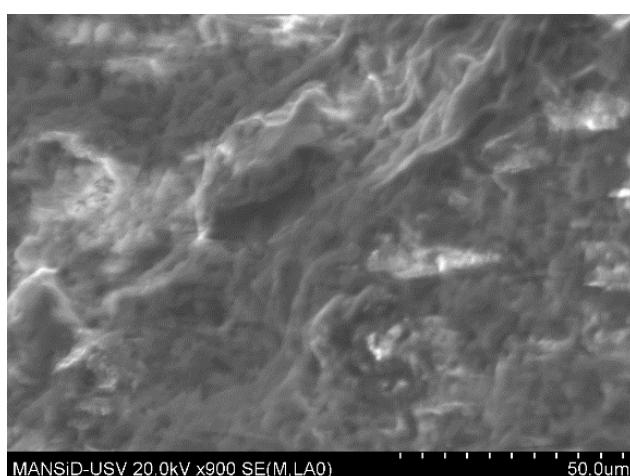


Рис. 1 SEM. Зразок до нагріву

Після 400°C спостерігався різкий спад міцності у всіх серіях. При 700–900°C – деградація C–S–H і перехід в пористу керамічну структуру, згідно SEM та XRD аналізів.

Зразки з 30% МК не показали значно вищої термостійкості, що узгоджується з літературними даними про оптимальну дозу мікрокремнезему (5–10%) для вогнетривких композитів

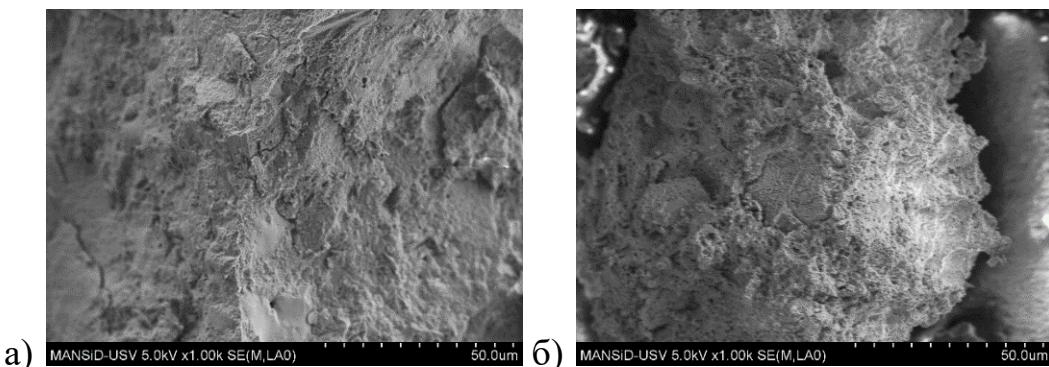


Рис.1 SEM. а) Зразок після нагріву до 500 °C; б) до 1085°C

Використання мікрокремнезему та метакаоліну істотно покращує мікроструктуру бетону, знижує капілярну пористість, однак щільна структура утруднює виведення пари, що за високих температур призводить до накопичення тиску, тріщиноутворення і вибухового розколювання. Цей ефект особливо виражений при підвищенні вологості (рис.2а).

Дані узгоджуються з працями Phan & Carino (2002), Behnood & Ziari (2008) та Khayat & Aitcin (1997), які підтверджують погіршення вогнестійкості HSC при температурах >400°C [1-3]. Модифіковані бетони з МК/МТК мають покращену початкову міцність і структурну щільність. Температури до 300°C сприяють зростанню міцності за рахунок автоклавного ефекту. Понад 400°C відбувається стрімка деградація міцності у зв'язку з руйнуванням C–S–H (рис.2б). Збільшення частки мікрокремнезему понад 25–30% не дає істотного термостійкого ефекту.

1. Ali Behnood, Hasan Ziari, Effects of silica fume addition and water to cement ratio on the properties of high-strength concrete after exposure to high temperatures, *Cement and Concrete Composites*, 2008, 30 (2), pp. 106-112

2. Mohamed Saafi, Effect of fire on FRP reinforced concrete members, *Composite Structures*, 2002, 58 (1), pp. 11-20

3. Özgür Eren, Tahir Çelik, Effect of silica fume and steel fibers on some properties of high-strength concrete, *Construction and Building Materials*, 1997, 11 (7-8) pp. 373-382

Universal empirical relation of the thermal conductivity for disordered materials

Yu.V. Horbatenko, O.A. Korolyuk, M.S. Barabashko, A.I. Krivchikov

B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering of the NAS of Ukraine,
47 Nauky Ave., Kharkiv 61103, Ukraine
email: horbatenko@ilt.kharkov.ua

In this study we analyzed thermal conductivity and heat capacity data of various polymer and composite materials, including epoxy resin and its derivatives, tetrahedrite Cu₁₀Zn₂Sb₄S₁₃ and some ceramics – Pb(Sc_{0.5}Nb_{0.5})O₃ (PSN), Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃ (NBT), Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃ (PMN), AgGaGe₃Se₈. The thermal conductivity of amorphous composite materials is characterized by the sum of two distinct contributions [1]:

$$\kappa(T) = \kappa_p + \kappa_c \quad (1)$$

κ_p associated with the particle-like propagation of excitations (like a "phonons"), while κ_c denotes the "coherences" contribution, due to the wave-like tunneling [2, 3].

According to the Matthiessen's rule the κ_{TLS} and κ_{pl} combined together through approximation:

$$1/\kappa_p = 1/\kappa_{TLS} + 1/\kappa_{pl} \quad (2)$$

where κ_{TLS} – is the thermal conductivity term associated with two-level systems (TLS-exitations) that are dominant at the lowest temperatures, and κ_{pl} – is the thermal conductivity term due to resonant scattering on quasi-local vibrations – it is an independent contribution in a wide temperature range, including the temperature region of plateau [2].

Amorphous solids exhibit anomaly at T_{max} related to the hump in the heat capacity that is clearly observed in coordinates C/T^3 vs T . This feature also occurs in the thermal conductivity, $\kappa(T)$, like plateau. We calculated the temperature dependences of thermal conductivity with the following fitting parameters – κ_{pl} , β , κ_0 , and E , where κ_{pl} is the value of the thermal conductivity plateau at T_{max} , which are taken from the C/T^3 vs T data; β is the coefficient of resonant scattering processes on TLS; κ_0 and E denote the characteristic parameters associated with the "coherences" contribution [3].

Characteristic temperatures T_p related with the parameters κ_{pl} and β were obtained, and a linear correlation between T_p and T_{max} was found. It was proposed a universal empirical relation to describe the temperature dependence of thermal conductivity near the plateau.

1. Simoncelli, M., Marzari, N., & Mauri, F. (2019). Unified theory of thermal transport in crystals and glasses. *Nature Physics*, 15(8), 809-813.
2. Krivchikov, A. I., & Korolyuk, O. A. (2024). Empirical universal approach to describing the thermal conductivity of amorphous polymers:

Effects of pressure, radiation and the Meyer–Neldel rule. *Low Temperature Physics* 50(4), 328-341.

3. Krivchikov, A.I., Horbatenko, Y.V., Korolyuk, O.A., Romantsova, O.O., Kryvchikov, O.O., Szewczyk, D., & Jezowski, A. (2023). Exponential approximation of the coherence contribution to the thermal conductivity of complex clathrate-type crystals. *Materialia*, 32, 101944.

Acknowledgement: This work supported by the National Research Foundation of Ukraine (Grant 2023.03/0012).

Effect of the graphene oxide doping on the electrical properties of poly(6-aminoindole)

Horbenko Yu.Yu., Aksimentyeva O.I., Kovalskyi Y .P.

Ivan Franko National University of Lviv, 6 Kyryla & Mefodia st., Lviv, 79005, Ukraine

yuliia.horbenko@lnu.edu.ua

Pursuing innovative, simplified, and cost-effective methods for obtaining composites based on organic semiconductors is important due to the increasing demand for functional materials with enhanced properties. The synthesis of conducting polymers in the presence of doping agents, particularly graphene oxide (GO), facilitates the development of materials with improved or novel, unpredictable properties emerging from the fundamental electronic interactions between the highly conjugated structure of GO and the delocalized electrons within the chains of conjugated polymers. Polyindole and its derivatives are noted for high electrical conductivity, good thermal stability, electrochromic and solvatochromic properties. It makes polyindoles promising candidates for various applications, including organic electronics, sensors, anti-corrosion coating, chemical power sources [3, 4]. This work aims to study the effect of graphene oxide on the electrical properties of poly(6-aminoindole) (PAIn).

The samples of PAIn/GO composites powder were obtained by “*in situ*” oxidative polymerization of 6-aminoindole using ammonium persulfate as an oxidant in a medium of acetonitrile or 0.5 M sulfuric acid with the presence of 0,43 wt.% of GO. In the IR spectrum of PAIn, a peak characteristic for asymmetric and symmetric vibrations of the NH₂ group at 3180–2980 cm⁻¹ is observed, which indicates the preservation of the amino group in the obtained product and the polymerization involving other reaction centers of the molecular chain. Absorption bands at 1620 cm⁻¹ (deformation vibrations of the NH₂ group), peaks at 1410 cm⁻¹ (C–H), 1600–1400 cm⁻¹ (C–C), 850–650 cm⁻¹ (C–H deformation in the plane of the benzene fragment). The peak at 1150–1050 cm⁻¹ indicates C–N bonds. It confirms the assumption about the polymerization mechanism in position 1,3 [6].

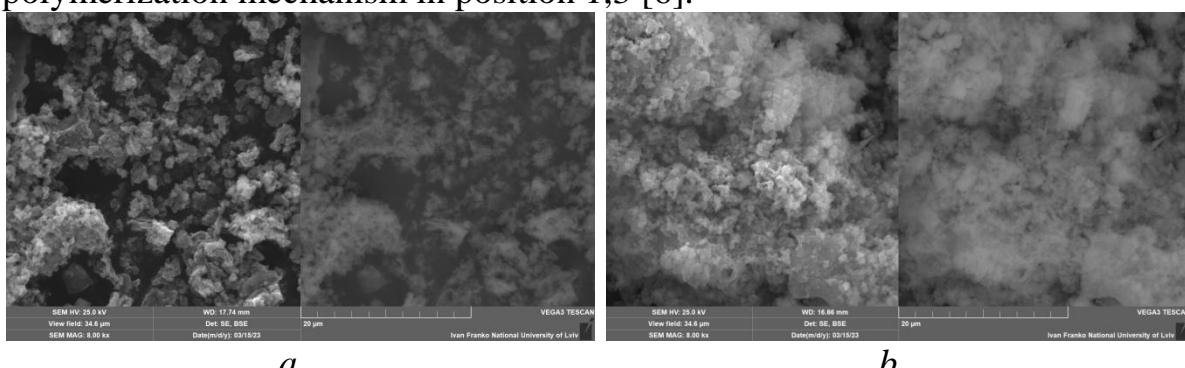


Fig. 1. SEM image of PAIn powder synthesized in a sulfuric acid medium (a) with the addition of GO (b) at a magnification of 8000

The structure of the obtained samples was studied using scanning electron microscopy. PAIn, synthesized in acetonitrile, has an ordered globular structure with the approximate size of the powder grains 10–60 μm . For PAIn synthesized in the sulfuric acid medium, smaller 10–50 μm particles are observed (Fig. 1, *a*). Adding GO to the reaction mixture causes more porous and smaller particle formations, mainly 5–15 μm (Fig. 1, *b*).

The temperature dependencies of the specific resistance in the temperature range of 290–373 K were studied. As the temperature increases, a decrease in the specific volume resistance of the polymer ρ is observed, which is typical for semiconductors. Representation of the exponential dependence in the coordinates of the Arrhenius equation $\ln \rho/\rho_0 - 1/T$ made it possible to determine the activation energy of conductivity E_σ , shown in the table:

The parameters of charge transport for PAIn obtained at different conditions

Sample	Polymerization medium	Specific electrical resistance, ρ (Ohm \times m)	Specific electrical conductivity, σ (S/m)	Conduction activation energy, E_σ (eV)
PAIn	Acetonitrile	$(1,86 \pm 0,04) \times 10^2$	$(0,54 \pm 0,04) \times 10^{-2}$	$1,08 \pm 0,02$
	Sulfuric acid	$(1,94 \pm 0,05) \times 10^5$	$(0,52 \pm 0,05) \times 10^{-5}$	$1,16 \pm 0,03$
PAIn/GO	Acetonitrile	$1,44 \pm 0,04) \times 10^3$	$(0,70 \pm 0,04) \times 10^{-3}$	$1,23 \pm 0,03$
	Sulfuric acid	$(3,02 \pm 0,04) \times 10^5$	$(0,33 \pm 0,03) \times 10^{-5}$	$1,15 \pm 0,05$

It was found that the highest conductivity is found in PAIn synthesized in acetonitrile, which can be explained by the formation of an ordered globular structure of the polymer. When GO is added, the conductivity of the polymer decreases slightly. For samples obtained in an aqueous solution of sulfuric acid, the specific conductivity values are significantly lower, possibly due to the disordered fine-crystalline microstructure of the powders, which creates significant obstacles to charge transport. Determined values of the E_σ prove the semiconducting nature of the synthesized polymer composites.

Acknowledgements: This work was partly supported by the Simons Foundation (PD-Ukraine-00014574).

1. M. Dündükçüa, G. Avcı, J. Prog. Org. Coat., 97, 110 (2016).
2. J. Arjomandi, H. Soleimani, M. H. Parvin, E. Azizi, Polym. Compos. (2017).
3. Y. Horbenko, O. Aksimentyeva, Y. Kovalskyi et al., Proceedings of the 2024 IEEE 14th International Conference NAP (2024)

Dielectric properties and a. c. conductivity of amorphous Se glass with impurities

A. Horvat, A. Molnar, V. Minkovych

*Faculty of Physics, Uzhhorod National University,
A. Voloshin str., 54, 88000 Uzhhorod, Ukraine*

Amorphous semiconducting chalcogenide alloys, mainly based on selenium (Se), are of interest both for their commercial use and technological importance in infrared optical and electronic devices such as fibers, optical switches, sensors and phase change memories [1,2], and also from a scientific point of view. With increasing temperature, pure amorphous selenium has a high crystallization capacity and a tendency to structural relaxation [3]. This problem can be overcome by alloying selenium with some impurities [4-6]. We investigated selenium glass samples doped by small concentrations of impurities such as As, Sb, In, Ga, Ge, etc. that change the crystallization ability and ageing effects in comparison with pure selenium glass.

Glassy materials were obtained by a standard method of melts cooling in a mixture of water and ice. Measurements of dielectric parameters and a.c. conductivity were carried out on samples in the form of discs with a diameter of 5 mm and a thickness of about 1 mm.

As an example, Figure 1 shows the effect of arsenic and indium impurities on the temperature dependence of the complex dielectric constant $\varepsilon^* = \varepsilon' + i\varepsilon''$ components of selenium-based glasses at a frequency of 1 kHz. In addition, curve 4 shows the behavior of selenium glass doped with indium at a frequency of 50 kHz. For a clearer presentation of the obtained results, the temperature dependences of ε' and ε'' are shown on a logarithmic scale. As can be seen, a small addition (up to 5 mol%) of indium leads to a lower crystallization temperature and a more pronounced anomaly of dielectric parameters, while arsenic stabilizes the glassy state.

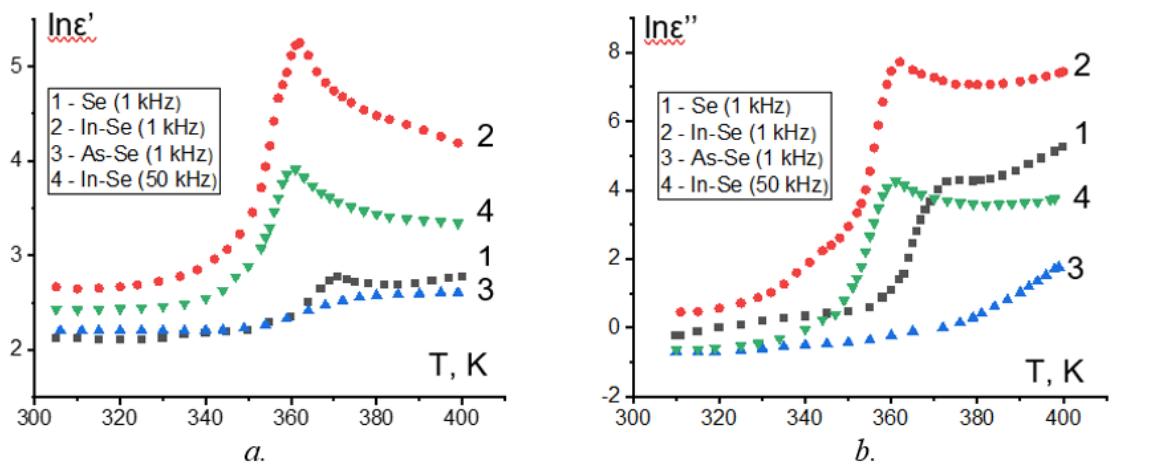


Fig. 1. The complex dielectric constant $\varepsilon^* = \varepsilon' + i\varepsilon''$ components temperature dependencies of the selenium-based glasses.

The a.c. conductivity σ_{ac} can be calculated from the dielectric losses: $\sigma_{ac} = \omega \epsilon'' \epsilon_0$. The plot between $\ln(\sigma_{ac})$ and $\ln(\omega)$ should be a straight line and the slope of the plot allows us to obtain the value of s in the empirical dependence $\sigma_{ac} = C\omega^s$ (Fig. 2). The value of the exponent s obtained for the studied In-Se glassy samples varies within the range of 0,5 – 0,8 for glassy state (below the crystallization temperatures), which is consistent with previous values of s obtained for the other chalcogenide glasses, and 0,4 – 0,5 near and after crystallization. The value and behavior of the s index as a function of temperature and/or frequency determines the dominating conductivity mechanism of the material. Several theoretical models have been proposed to explain the conduction mechanism. In our case, the s -index decreases with increasing temperature, so the most appropriate model to describe the conductivity in selenium-based glasses is the correlated carrier jumping over the barrier [7]. Using the value of s , we estimate the maximum height of the potential barrier for carriers, $W_m \approx 0.37$ eV.

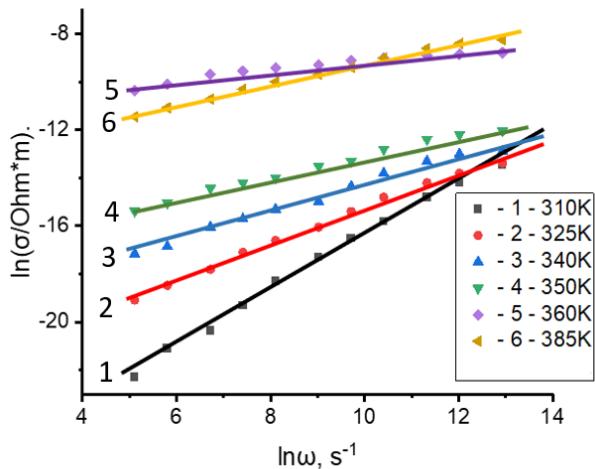


Fig.2. AC conductivity vs. frequency of In doped selenium glass.

proposed to explain the conduction mechanism. In our case, the s -index decreases with increasing temperature, so the most appropriate model to describe the conductivity in selenium-based glasses is the correlated carrier jumping over the barrier [7]. Using the value of s , we estimate the maximum height of the potential barrier for carriers, $W_m \approx 0.37$ eV.

1. J. D. Musgraves. Chalcogenide glasses: Engineering in the infrared spectrum. American Ceramic Society Bulletin. 2024, v. 103, No. 4, p. 22 - 28.
2. H. Kumar, A. Lal Saroj. Recent Advances in Chalcogenide Glasses and their Applications. In Book «Materials Science: A Field of Diverse Industrial Applications». 2023, p. 26-45.
3. A. A. Horvat, V. I. Mikla, V. V. Minkovich, A. A. Molnar, A. M. Solomon. Dielectric spectroscopy of aged glassy and revitrified selenium. J. of Optoelectronics and Advanced Materials. 2021, v. 23, No. 5-6, p. 264 – 269.
4. P. Honcová, M. Včeláková, R. Svoboda, G. Sádovská, J. Málek. Structural relaxation of Sb_2Se_{98} chalcogenide glass and its effect on following crystallization. Ceramics International. 2025, v. 51, Issue 5, p. 5567-5575.
5. R. Svoboda. Relaxation processes in Se-rich chalcogenide glasses: Effect of characteristic structural entities. Acta Materialia. 2013, v. 61, Issue 12, p. 4534–4541.
6. H. Kumar, A. Sharma, N. Mehta. Study of thermo-mechanical properties in glassy Se and $Se_{98}M_2$ ($M=In, Sb$ and Sn) alloys. Materials Letters. 2014, v. 121, No. 15, p. 194-197.
7. S. R. Elliott. A.c. conduction in amorphous chalcogenide and pnictide semiconductors. Advances in Physics. 1987, v. 36, No. 2, p. 135–217.

Structural and morphological modification in annealed rare-earth doped ZnO/Si structures

Z. Zhuchenko¹, G. Tarasov¹, A. Zolotovsky¹, C. Leroux², D. Pelloquin², C. Guillaume³, C. Labb  ³, X. Portier³

¹*V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of the NAS of Ukraine, 45 Prospect Nauky, 03028 Kyiv, Ukraine*

²*CRISMAT, UMR CNRS 6508, ENSICAEN, Normandie Universit  , 6 Boulevard du Mar  chal Juin, 14050 Caen Cedex 04, France*

³*CIMAP, CEA, UMR CNRS 6252, ENSICAEN, Normandie Universit  , 6 Boulevard du Mar  chal Juin, 14050 Caen Cedex 04, France*

The doping of ZnO thin films by rare earth (RE) elements is well-known procedure, allowing to produce white LEDs structures or to enhance the efficiency of a solar cell with the down and/or up-conversion phenomena. At low doping the wurtzite-type structure of films is not affected, only lattice parameters become increased. However, when annealed at temperatures (T_a) higher than 700°C, secondary phases appear at the bottom of ZnO films grown on Si. At high-temperature annealing of the Eu/Tb codoping of ZnO thin films on an oriented (001) Si substrate, the significant change in the energy transfer between Eu and Tb ions was observed. It is caused by a segregation of the lanthanides towards the surfaces of the film (top surface and film/substrate interface) whereas the dopant distribution remained almost uniform in the as-grown film. For higher T_a values, a diffusion of Si from the substrate is also observed. As a results, different silicate phases: zinc silicate Zn_2SiO_4 and RE silicates appear. The best known are: the RE_2SiO_5 orthosilicates, the $RE_2Si_2O_7$ disilicates and the RE silicates related to apatite structures: $RE_{10-x}(SiO_4)_6O_{2-x}$ [1]. Moreover, disilicates are able to exhibit various polymorphs, which also depend on the synthesis temperature, on the pressure and on the considered RE element. As a matter of fact, ZnO disappears upon high annealing treatment and only rare earth silicates can explain the PL properties. All these transformations have to be studied in more detail.

Codoped (Tb,Eu) ZnO films grown by magnetron sputtering on silicon substrate are under investigation here. The annealing of these films at 1200°C leads to the formation of a F-type pyrosilicate $(Eu,Tb)_2Si_2O_7$. A detailed microstructural study with a combination of several tools (STEM HAADF imaging, STEM EELS mapping, EELS spectroscopy and dynamical PEDT refinements method) allows to conclude that Tb and Eu have, for each of them, two distinct preferential sites in the structure. EELS mapping confirms these preferential sites, especially for Tb. The formation of this RE disilicate upon annealing at 1200°C has increased PL emission of Eu owing to the energy transfer between Tb^{3+} to Eu^{3+} . The distances between RE elements in

this compound have been found to be between 3.8 and 4.4 Å, which is apparently favorable to the mentioned above energy transfer. The small evolutions of the PL spectrum between the two films annealed at 1100°C and 1200°C are explained by the appearance of the pyrosilicate (disilicate) phase for the highest temperature whereas only the oxyapatite form was observed for the lower temperature.

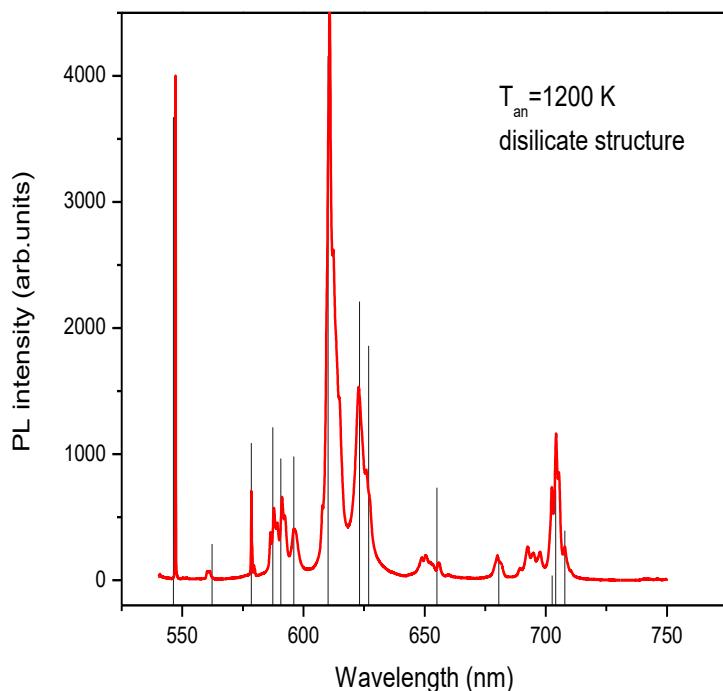


Fig. 1. PL spectra of Tb^{3+} и Eu^{3+} in $\text{RE}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ pyrosilicates, triclinic structure (red line) and simulated spectrum (vertical bars).

This has been demonstrated by the calculation of the probabilities and intensities of the luminescence transitions of the RE ions in the corresponding crystal matrices (Fig. 1).

The study is extended also on the erbium doped ZnO films with doping rate of 6 at.%. grown on a (100) oriented silicon wafer. A new disilicate polymorph for the erbium disilicate $\text{Er}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ was revealed upon high temperature anneal treatment. This polymorph adopts the orthorhombic E-type disilicate structure that is usually observed for ($\text{Ho} \rightarrow \text{Eu}$) with larger ionic radius. The challenge with this study is to find the good thermal annealing range and the best lanthanide doping to optimize/improve the optical properties ZnO based materials.

1. Leroux, C.; Guillaume, C.; Labb  , C.; Portier, X.; Pelloquin, D. *Inorg. Chem.* **2021**, *60*(7), 4508–4516. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c03361>.

**Гетеропереходи на основі шаруватого кристалу InSe з феритовими
плівками ZnFe₂O₄**

Ткачук І.Г¹., В.І. Іванов¹, Орлецький І.Г²., Ковалюк З.Д.¹

¹*Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН
України, Чернівецьке відділення, Чернівці, 58001, Україна,*

²*Чернівецький національний університет імені Юрія Федъковича,
58012 Чернівці, Україна*

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

Методом низькотемпературного спрей-піролізу виготовлено фоточутливі гетеропереходи n-ZnFe₂O₄/p-InSe. На нагріту підкладку з шаруватого кристалу p-InSe розпилювався водний розчин відповідного складу. В результаті чого на його поверхні утворювалась тонка плівка n-ZnFe₂O₄. Використання шаруватих напівпровідників дозволяє отримувати якісні інтерфейси, навіть при значній розбіжності параметрів кристалічних граток контактуючих матеріалів. Проведено дослідження фотоелектричних та оптичних властивостей отриманого гетеропереходу, побудовано відповідні графічні залежності: вольт-амперні характеристики при різних температурах, температурна залежність висоти потенційного бар'єру, спектральна залежність відносної квантової ефективності в інтервалі енергій фотонів 1.2÷3.1 eV. На основі аналізу температурних залежностей прямих і зворотних гілок вольт-амперних характеристик визначено енергетичні параметри гетеропереходу. Визначені механізми формування прямого та зворотного струмів крізь енергетичний бар'єр n-ZnFe₂O₄/p-InSe.

Донедавна основним матеріалом високопотужної електроніки був кремній, але використання напівпровідників з більшою шириною забороненої зони (вища робоча температура) та напругою пробою (більша робоча напруга), великим значенням рухливості носіїв заряду (більші робочі струми і частоти) та кращою теплопровідністю (вища густина потужності), дозволяють підвищити поріг стабільності напівпровідникових пристрій. Такими напівпровідниками є GaSe та InSe та створені на їх основі гетеропереходи та різного ряду нанокомпозити. Для виготовлення анізотипних гетеропереходів n-ZnFe₂O₄/p-InSe використовувалися підкладки розмірами 30x40x10мм, які відшаровувалися від вирощених методом Бріджмена кристалів моноселеніду індію p-InSe. Діркова електропровідність забезпечувалася легуванням кадмієм (0.1 % за масою).

Визначена на основі холлівських досліджень концентрація носіїв заряду становила $p \approx 10^{14} \text{ см}^{-3}$ при температурі 290 К. Рухливість дірок у перпендикулярному напрямку відносно вісі симетрії С дорівнювала $\mu_{pH} \approx 55 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$.

Тонкі плівки ZnFe_2O_4 виготовлялися методом спрей-піролізу із водних розчинів солей $\text{ZnCl}_2\text{2H}_2\text{O}$ та $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ із концентрацією 0,1 М, які змішувалися за допомогою магнітної мішалки у об'ємах, які відповідають співвідношенню елементів $\text{Fe}/\text{Zn} = 2$. Поверхня підкладок селеніду індію перед розпорощенням аерозолю нагрівалася до 350 °C за допомогою столика обладнаного терморегулюючими пристроями. Для одержання плівок ZnFe_2O_4 , які мали товщину 0,3 мкм необхідно було розпилити 25 мл розчину зі швидкістю від 3 до 5 мл/хв. Розпилення для забезпечення достатнього ступеня окислення металів здійснювалося в умовах атмосферного тиску.

Для з'ясування механізму протікання струму в досліджуваному гетеропереході були проведені вимірювання температурних залежностей ВАХ в діапазоні 244-317 К. В напівлогарифмічних координатах вони показані на рис. 3. Як видно з рисунку, в області прямих зміщень $V > 3kT/e$ спостерігаються прямолінійні ділянки. Аналіз прямих гілок ВАХ гетероструктур n-ZnFe₂O₄/p-InSe побудованих в напівлогарифмічному масштабі, показав, що залежність $\ln I = f(V)$ складається із двох прямолінійних ділянок, що свідчить про експоненційну залежність струму від напруги і наявність двох домінуючих механізмів переносу заряду в досліджуваному інтервалі напруг. Визначені значення коефіцієнта неідеальності ($\Delta \ln(I)/\Delta V = e/nkT$ становлять $n = 4,9$ ($V < 0.8$ В) і $n = 12,3$ ($V > 1,2$ В). Велике значення показника неідеальності та слабкий нахил залежностей $\ln(I) = f(V)$ при різних температурах є свідченням тунельної природи механізму струмопереносу на ділянці низьких напруг $0 < V < 0.8$ В. На прямолінійній ділянці з ВАХ у напівлогарифмічному масштабі при $V > 1,2$ В є значне збільшення коефіцієнта неідеальності що може свідчити зміні природи механізму струмопереносу тунелювання на шунтуючі струми. Ці струми можуть бути викликані каналами, утвореними при формуванні фронтальної оксидної плівки.

Structural studies of Ge-Sb-Se alloys

Kochubei H.¹, Stronski A.¹, Dzhagan V.¹, Shportko K.¹, Shamrovska P.²,
Zahn D.R.T²

1- *V.Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics NAS Ukraine,
Kyiv, Ukraine*

2-*Chemnitz University of Technology, Chemnitz, Germany
kochubei.hanna@gmail.com*

Ge-Sb-Se alloys possess a broad glass formation region, enabling customizable properties through compositional adjustments [1-4]. These alloys are characterized by high nonlinear optical properties, excellent transmission in the IR, and notable acousto-optic properties [2]. Such features allow for targeted optimization of the material's parameters, making them suitable for diverse applications, including optical sensors, infrared lenses, amplifiers, and switching components in optical communication systems.

In this work, the $\text{Ge}_{16}\text{Sb}_{24}\text{Se}_{60}$ alloy was studied by X-ray diffraction and Raman spectroscopy. The alloy under study was obtained by the traditional melt quenching method. Using the Rad GTK+ software, the radial distribution function was calculated from which the radius of the first and second coordination spheres was obtained, and the bond angle Θ was calculated.

The position of the first peak of the radial distribution function (RDF) gives the distance to the nearest neighbor r_1 , and similarly, the position of the second peak gives the distance to the next neighbor r_2 . The RDF provides only a limited amount of information, which is essentially limited to the local structure around a given atom, i.e. bond lengths and bond angles. Knowing both bond lengths r_1 and r_2 allows us to obtain the value of the bond angle θ . The values of r_1 and r_2 obtained from the radial distribution function of $\text{Ge}_{16}\text{Sb}_{24}\text{Se}_{60}$ glasses were 2.56 and 3.79 Å, respectively, and the value of the bond angle θ was 95.5°.

Diffraction and EXAFS studies [1] have shown that the structure of Ge-Sb-Se glasses can be described by the chemical ordered network model (CONM). According to the CONM model, in the Ge-Sb-Se system, the bonds between M and Se (M = Ge or Sb) are predominant, and the number of M-M and Se-Se bonds is minimized. The network is constructed from structural units such as $\text{GeSe}_{4/2}$ or $\text{SbSe}_{3/2}$, which are connected by their corners and edges or through Se-Se bridges in Se-rich glasses. In systems with low Se content, where there are not enough Se atoms to satisfy the binding needs of M atoms, M-M bonds are also expected to be present [1]. According to [3], the lengths of the bonds are in the range: Ge-Se 2.36-2.37 Å, Ge-Ge - 2.45-2.46 Å, Sb-Se - (2.58-2.59 Å). It is noted that the structure of the $\text{Ge}_{20}\text{Sb}_{20}\text{Se}_{60}$ glass (which is quite close in composition to the $\text{Ge}_{16}\text{Sb}_{24}\text{Se}_{60}$ glasses studied in this work) corresponds to the model of a chemical ordered network and

that, along with the structural units $\text{GeSe}_{4/2}$ and $\text{SbSe}_{3/2}$, there are $\text{Se}_{3/2}\text{Ge}-\text{Ge}(\text{Sb})\text{Se}_{3/2}$ blocks to compensate for selenium deficiency [3]. The obtained values of r_1 and r_2 and θ for the studied $\text{Ge}_{16}\text{Sb}_{24}\text{Se}_{60}$ glasses are consistent with the literature data for other Ge-Sb-Se glass compositions.

Raman spectroscopy was used to obtain structural information. The following bands can be recognized in the Raman spectra of Ge-Sb-Se glasses [4], which correspond to the vibrations of the corresponding structural units: ~ 100 cm^{-1} band - vibrations in Sb- $\text{Se}_{3/2}$ pyramids, ~ 150 cm^{-1} band - Sb-Sb vibrations in $\text{Se}_2\text{Sb}-\text{SbSe}_2$, ~ 170 cm^{-1} band - Ge-Ge vibrations in $\text{Ge}-\text{Se}_{4-n}\text{Ge}_n$, ~ 190 cm^{-1} band - Sb-Se stretching vibrations in Sb- $\text{Se}_{3/2}$ pyramids, ~ 200 cm^{-1} band - symmetric stretching vibrations of angular $\text{GeSe}_{4/2}$ tetrahedra, band ~ 215 cm^{-1} - vibrations of $\text{GeSe}_{4/2}$ tetrahedra, bands in the region ~ 235-250 cm^{-1} - vibrations of different structural units of Se, band ~ 265 cm^{-1} - vibrations of angular $\text{GeSe}_{4/2}$ tetrahedra, band in the region ~ 285-300 cm^{-1} - asymmetric vibrations of $\text{GeSe}_{4/2}$ tetrahedra. The spectra of Raman light scattering of the studied $\text{Ge}_{16}\text{Sb}_{24}\text{Se}_{60}$ glasses were decomposed using the above-mentioned bands (156, 170, 190, 201, 216, 232, 267 cm^{-1}) [4], and a good agreement with the experimental spectra was obtained. Raman experiments show the presence of $\text{GeSe}_{4/2}$ and $\text{SbSe}_{3/2}$ structural units in $\text{Ge}_{16}\text{Sb}_{24}\text{Se}_{60}$ glasses, as well as some chemical ordering disorders in the form of Se-Se and M-M bonds. However, further studies of their structure at the atomic level are still needed to help us better understand their structural properties.

ACKNOWLEDGEMENTS H.Kochubei has a pleasure to acknowledge support by project DAAD №57703089 . The work was partially supported by the priority research programmes of NAS of Ukraine (0125U000799)

1. Pethes, R. Chahal, V. Nazabal, C. Prestipino, S. Michalik, J. Darpentigny, P. Jóvári, Chemical order in Ge-Ga-Sb-Se glasses, Journal of Non-Crystalline Solids, Volume 484, 2018, Pages 49-56, ISSN 0022-3093, <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2018.01.017>.
2. Grayson, Michael & Zohrabi, Mo & Bae, Kyuyoung & Zhu, Jiangang & Gopinath, Juliet & Park, Wounjhang. (2019). Enhancement of third-order nonlinearity of thermally evaporated GeSbSe waveguides through annealing. Optics Express. 27. 33606. 10.1364/OE.27.033606.
3. Pethes, R. Chahal, V. Nazabal, C. Prestipino, A. Trapananti, S. Michalik, et al., Chemical ShortRange Order in Selenide and Telluride Glasses, J. Phys. Chem. B. 120 (2016) 9204–9214. doi:10.1021/acs.jpcb.6b05996.
4. R. Svobodaa, J. Máleka, M. Liška Correlation between the structure and structural relaxation data for $(\text{GeSe}_2)_y(\text{Sb}_2\text{Se}_3)_{1-y}$ glasses Journal of Non-Crystalline Solids 505 (2019) 162-169. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2018.11.013>

Електричний імпеданс плівок меланіну, сформованих методом самоорганізації

Обухова Т.Ю.,^a Семененко М.О.,^{a,b,c} Пилипчук О.С.,^c
Кравченко С.О.,^b Остапенко О.Ю.,^d Саріков А.В.^{a,b,d}

^aКПІ ім. Ігоря Сікорського, пр. Берестейський 37, 03056 Київ

^bІнститут фізики напівпровідників НАН України, пр. Науки 41, 03028 Київ

^cІнститут фізики НАН України, пр. Науки 46, 03028. Київ

^dКНУ імені Тараса Шевченка, пр. Глушкова 4-г, 03022 Київ

В останні десятиліття активно вивчаються механізми провідності природного біополімеру меланіну, який можна використовувати в електроніці. Вважається, що провідність меланіну залежить від ступеня гідратації плівки та методу його отримання і відповідає структурі, яка характеризується електронно-іонною провідністю [1].

У нашій роботі, для дослідження імпедансу, плівки меланіну товщиною 1.7 мкм були сформовані на поверхні зустрічно-штирьової системи, з відстанню між електродами близько 30 мкм, шляхом витримування підкладок у 0.8% водному розчині меланіну протягом одного тижня за кімнатної температури. На рис. 1а зображені криві залежностей $C(\omega)$ та $\text{tg}(\omega)$ для еквівалентної схеми CpD (Rhode&Schwartz 1200). Типова схема заміщення еквівалентної схеми імпедансу визначається частотною залежністю $\text{tg}(\omega)$. Така форма кривої добре описується паралельною еквівалентною схемою заміщення, де один контур складається лише з резистора, а інший із послідовно з'єднаних резистора та ємності, $Rs \parallel (Rp + Cp)$. Нелінійне зниження реальної та уявної частини діелектричної проникності (рис. 1б) свідчить про відсутність інших механізмів розсіювання окрім провідності і вказує на те, що діелектрична відповідь системи на зміну електричного поля формується комбінацією повільних і швидких процесів поляризації. Така поведінка типова для плівок, де переважає іонна провідність і немає виражених дипольних чи орієнтаційних резонансів.

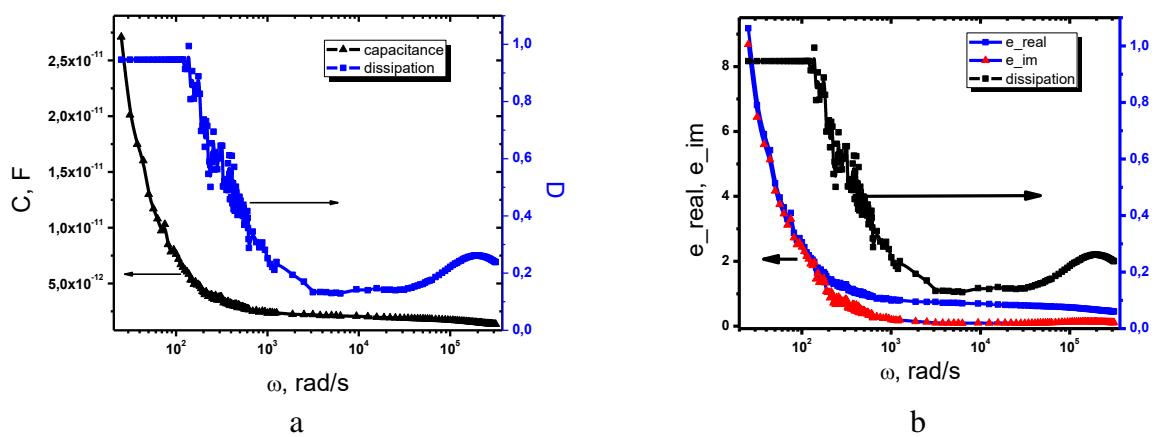


Рис. 1. Залежності $C(\omega)$, $\text{tg}(\omega)$ (а) та діелектричних функцій (б) досліджуваних плівок меланіну.

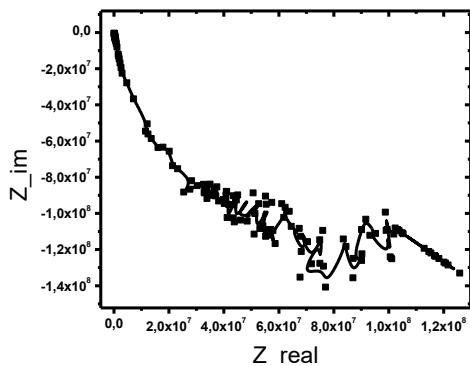


Рис. 2. Діаграма Ніквіста.

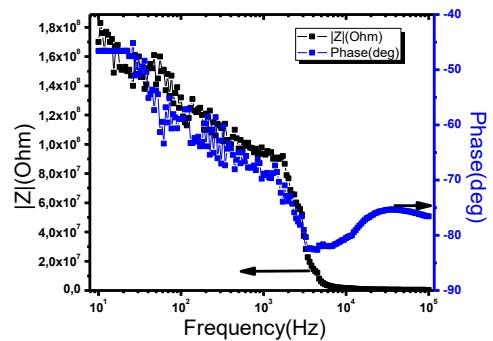


Рис. 3. Фазова діаграма.

Графік Ніквіста, представлений на рис. 2, показує співвідношення між резистивними та реактивними компонентами імпедансу в різних частотних діапазонах. При низьких частотах (права частина графіка на рис. 2) досліджувані плівки мають значний опір. Уявна складова діелектричної проникності вказує на домінуючий ємнісний характер плівки меланіну, що свідчить про поляризаційні ефекти та можливий внесок йонної провідності. При високих частотах (ліва частина графіка на рис. 2) значення уявної частини діелектричної проникності зменшуються, що вказує на перехід до домінування резистивної складової. Це означає збільшення ефективності електронного транспорту, і плівка меланіну веде себе як провідник. Така поведінка відповідає моделі Randles' circuit. На рис. 3 представлені результати апроксимації залежності комплексного опору від частоти у відповідності до моделі Randles' circuit. У діапазоні до 300 Гц модуль імпедансу має високі значення ($>10^8$ Ом), а величина фази становить близько $-50\ldots-60^\circ$, що свідчить про домінування ємнісної поведінки за наявності великого паралельного опору, тобто слабкої провідності. У діапазоні ~ 300 Гц – 10 кГц опір поступово зменшується, а величина фази наближається до -80° , що вказує на активацію поляризаційних процесів, ймовірно, за участі йонів та тунелювання. На частотах >10 кГц опір стабілізується на рівні $<10^7$ Ом, а фаза зменшується за абсолютним значенням, що свідчить про домінування послідовного опору та зменшення впливу ємності на провідність плівок.

1. Mostert A.B. 2021 <https://doi.org/10.3390/polym13101670>.

МОДЕЛЬНІ ФОНОННІ СПЕКТРИ КРИСТАЛІВ З СТРУКТУРОЮ A15

I.I.Небола, А.В.Корнейчук, А.Ф.Катаниця, Д.І.Кайнц, І.М.Шкирта, О.О. Спесивих
Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54
Україна, e-mail: ivan.nebola@uzhnu.edu.ua

Характерною особливістю кристалічної структури сімейства кристалів з структурою A15^h, яка охоплює клас найбільш практично вживаних надпровідників A₃B (серед них (A-Nb,B-Sn,Al,Ge,C)) дозволяє розглядати її, як зручний об'єкт для проведення модельних розрахунків фононних спектрів в еквідistantному наближені по скільки тоді ж дистанційні пари одніменних атомів реалізуються, вперше тільки на віддалях кратних параметру елементарної комірки. Тому таке логічне наближення дозволяє перейти до опису сукупності силових констант, які визначається тільки міжатомною віддалю (еквідistantne наближення в розрахунку модельних фононних спектрів складних кристалів) [1,2] і не залежати від сорту взаєmodіючих атомів. Виходя із результатів роботи [3] приведемо модельний розрахунок фононних залежностей і густин станів кристалів з структурою A15. Опищемо мотив елементарної комірки, як масово модульовану структуру [4]. Тоді реальна структура розглядається, як природна масово модульована надгратка з параметрам (4ax4ax4a) на метриці протокристалу (ахаха), (простої кубічної гратки) ПКГ. Мотив елементарної комірки може бути описаний з використанням (3+3) базису Композиційні особливості реалізації складних кристалів та систем за механізмом заповнення позицій, вакансіями та атомами різного сорту в трансляційно еквівалентних позицій, заданих базисом протокристалу, охоплюються концепцією надпросторової симетрії [1-4]. Дисперсійні криві фононного спектра складних кристалів при цьому визначаються, як розв'язки матричного рівняння:

$$|A - \omega^2 B| = 0, \quad (1)$$

де A -матриця сформована з фур'є компонент динамічних матриць одноатомного протокристалу, яка описує силове поле взаєmodій. Матриця B сформована подібним чином з амплітуд масових модуляційних функцій [4] і визначає поле масових характеристик кристалу. Динамічні матриці одноатомного протокристалу $D_{\alpha\beta}(k + q_i)$ визначаються із співвідношення

$$D_{\beta\gamma}^l(k + q_i) = \sum_{(l \neq 0)} \alpha_{\beta\gamma}^l \frac{l_\beta l_\gamma}{l^2} (1 - e^{i(k+q_i)l}) \quad (2)$$

де $\alpha_{\beta\gamma}^l$ матриця силових постійних взаєmodій атомів в 0 – ій і l – ій позиціях, l_β, l_γ - проекції вектора l на осі β, γ .

Відміти, при цьому різницю комбінацій заповнення орбіт, метрики протокристалу, атомами і вакансіями в залежності від вибору локалізації початку відліку в різних 64 позиціях протокристалу.

Реалізація опису реальних кристалічних структур шляхом вибору (3+d) - мірних базисів [1-4] дозволяє ввести в опис сукупність векторів модуляції, яка охоплює заповнення позицій ПКГ структур для (sa×sa×sa)-надграток. Такий опис кристалічних утворень кубічної сингонії з (sa×sa×sa)-надгратками

закладений в (3+d)- мірних базисах. Сукупність векторів модуляції q_i для (4a \times 4a \times 4a)-надграткою містить 64 вектори модуляції.

Мотив структури дозволяє визначити 15 початків відліку для формування орбіт, які задають не нульові динамічні матриці протокристалу. Зауважимо, що реалізація любого мотиву реального кристалу здійснюється шляхом заповнення конкретних позицій надгратки m_j . Розв'язок системи рівнянь (5) дозволяє визначити функції розподілу маси, які задається у вигляді суперпозиції модуляційних функцій

$$m(r_k, \tau_l) = \sum_{j=1}^8 \rho(q_j, b_j^*) \exp\{i(q_j r_k + b_j^* \tau_l)\}. \quad (3)$$

для компактності запису введемо позначення $\rho_j = \rho(q_j, b_j^*) = \rho(q_j) = \rho_j$
 $m_j = m(q_j, b_j^*) = m(q_j) = m_j$

Розв'язки (3) (для будь-якого фіксованого значення τ) задають, амплітуди масових модуляційних функцій $\rho(q_i) = \rho_i$, які дозволяють сформувати матрицю дефекту мас В.

Узагальнена динамічна матриця А пов'язана з визначеннями Фур'є компонентами динамічних матриць одноатомного протокристалу, згідно рівняння аналогичного рівнянню (5) відносно компонент $D_{\beta\gamma}^l(k + q_i)$. Відмітимо, що по компонентні розв'язки для $\rho(D_{\beta\gamma}^p(k + q_i), (q_i - q_j))$ аналогічні (6). Сформована матриця А приймає вигляд:

$$A = \rho(D_{\beta\gamma}^p(k + q_i), (q_i - q_j)) = \rho(D_{(q_i - q_j)}(k + q_j)) = D_{(q_i - q_j)}(k, q_j).$$

Для компактності запису введені позначення $D_{(q_i - q_j)}(k, q_j) = D_{q_1}(k, q_1)$. Відмітимо, що залежність від $(k + q_j)$ приводить до набору 64 динамічних матриць $D_{(q_i - q_j)}(k, q_j)$, та наголосимо, що існує відмінність у виразах матриць типу $D_{q_5}(k, q_8), D_{q_6}(k, q_8)$ та $D_{q_7}(k, q_8)$, в залежності від вибору локалізацій початку відліку а одже різного заповнення позицій орбіт. Для розрахунку власних значень системи (1) розроблено програмне забезпечення в середовищі Maple [5] і проведено модельні розрахунки дисперсії фононів і густини станів кристалів з структурою A15. Розраховані модельні фононні спектри і густини станів задовільно корелюють з даними [6] ..

1. De Wolff P. M., Janssen T., Janner A.. (1981).Acta Cryst. A37., 625-636
2. Janner A. and Janssen T. (1977)..Phys. Rev. B **15**, 643 – 658.
3. Janssen T.,(1979). J. Phys. C: Solid State Phys.,. **12**, 24. 5381–5392.
4. Nebola I.I., Katanytsia A.F., Shteyfan A.Ya., Shkyrta I.M., Studenyak I.P., Timko M., Kopčanský P.. (2020). Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics.**23**,366-371.
5. <https://maple.cloud/app/5753562177994752/Modeling+of+dispersions+of+phonon+spectra>.
6. Tütüncü H. M., Srivastava G. P, Bağcı S., and. Duman1 Fen-Edebiyat S. (2006) PHYSICAL REVIEW B 74, 212506 .

Optical and photorefractive properties of co-doped $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ ferroelectrics - semiconductors

A. Grabar, V. Voloshyn, K. Gukhov, A. Kohutych

Uzhhorod National University, Pidhirna 46, 88000 Uzhhorod, Ukraine

The $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ (SPS) crystals are recognized as efficient photorefractive (PR) materials [1,2], with their properties being tunable through doping. To date, the most effective doped compositions include SPS crystals with 0.5–1.5 mol.% of antimony, which exhibit the highest two-wave mixing gain at a 633 nm laser wavelength - up to 18 cm^{-1} [1–3]. Similarly, tellurium-doped samples with comparable dopant concentrations [1,2] demonstrate notable PR sensitivity at 633 nm, as well as in the near-infrared region. Despite the favorable characteristics of Sb-doped SPS, the long-term stability of the recorded PR gratings under prolonged illumination remains a critical limitation for practical applications. This instability is attributed to the interplay between phase gratings, formed by the diffusion of photoinduced charge carriers, and "local" amplitude gratings resulting from a pronounced photochromic effect [3]. This issue has driven continued efforts to optimize the SPS crystal composition.

Efforts to improve the PR performance of SPS crystals through doping with alternative elements (e.g., Cu, Ag, Ge, Mn, Rh, Pb, Se) have not yielded significant enhancements. As an alternative approach, thermally induced diffusion of metals such as Cu and Ag into the surfaces of pre-grown crystals was implemented in [4]. Among the various doping strategies explored, the co-doping with 1 mol.% Sb and 1 mol.% Cu has proven to be particularly effective in improving the temporal stability of PR gratings, a key advantage confirmed by our experimental results.

Our PR studies involved measurements of steady-state two-wave mixing: the amplification of a signal beam via diffraction from the interference grating, as well as dynamic measurements using a holographic setup with phase modulation introduced via a piezo-actuated mirror (dynamic interferometer). These experiments enabled the determination of fundamental PR parameters, whose features and intensity dependencies are analyzed in relation to structural characteristics and a defect localization model informed by photo-EPR data [5,6]. The advantage of this Sb-Cu co-doped SPS is mainly supported by experiments employing a phase-modulated signal beam in the optical setup depicted in Fig. 1, where an AC voltage is applied to a piezo-

actuated mirror. The results presented in Fig. 2 reveal that the PR response exhibits a quadratic dependence on the modulation frequency. This behavior confirms the presence of a photorefractive phase grating shifted by 90° , indicating that the space-charge field is primarily formed through a purely diffusive mechanism. However, if the initial grating contains a significant "local" (amplitude) component, the overall phase shift of the PR grating will deviate from the ideal 90° . In this case, the modulation of the signal beam intensity will exhibit also a linear component, reflecting the mixed nature of the underlying grating formation mechanisms, as it was observed in SPS:Sb. In conclusion, Sb–Cu co-doped SPS crystals represent the most efficient composition for a wide range of PR applications. Their enhanced temporal stability, combined with strong diffraction efficiency and a predominantly diffusive charge transport mechanism, make them highly suitable for both steady-state and dynamic holographic recording schemes.

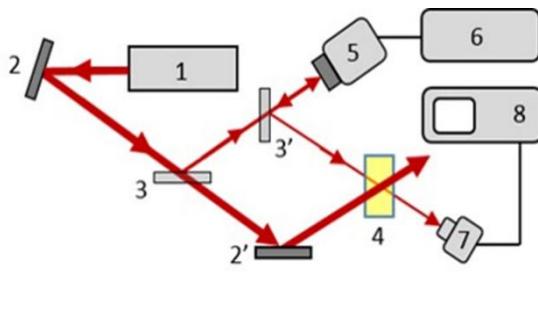


Fig. 1: Scheme for the measurements of the stationary two-wave mixing gain and the PR amplification in the phase-modulated regimes: 1 – He-Ne laser, 2 - mirrors, 3 – beam splitter, 4 - $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ co-doped sample, 5 – piezo-mirror, 6 - generator, 7 – photodiode, 8 - digital oscilloscope.

- [1] A. Grabar, M. Jazbinsek, A. Shumelyuk, Yu. Vysochanskii, G. Montemezzani, and P. Günter, Photorefractive effects in $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$, in: Photorefractive Materials and Their Applications 2: Materials, Vol. 114, Springer (2007) pp. 327 – 362.
- [2] T. Bach, M. Jazbinšek, G. Montemezzani, P. Günter, A.A. Grabar, Y.M. Vysochanskii, J. Opt. Soc. Am. B 24 (2007) 1535.
- [3] P. Mathey, G. Gadret, A. Grabar, I. Stoika, Y. Vysochanskii, Optics Commun., 300 (2013) 90.
- [4] V. Shvalya, J. Zavašník, V. Nasretdinova, H. Uršič, J. Kovač, A. Grabar, A. Kohutych, A. Molnar, D.R. Evans, D.D. Mihailović, U. Cvelbar, J. Mater. Chem. C 8 (2020) 9975.
- [5] B.E. Kananen, E.M. Golden, S.A. Basun, D.R. Evans, A.A. Grabar, I.M. Stoika, J.W. McClory, N.C. Giles, L.E. Halliburton, Opt. Mater. Express 6 (2016) 3992.
- [6] T.D. Gustafson, E.M. Golden, E.M. Scherrer, N.C. Giles, A.A. Grabar, S.A. Basun, D.R. Evans, J.E. Slagle, L.E. Halliburton, Journal of Applied Physics 129 (2021) 085702.

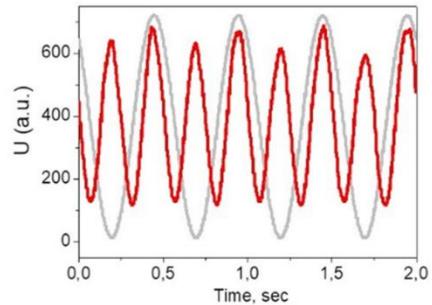


Fig. 2: An example of the signal beam intensity oscillogram (red line), obtained in the dynamic interferometer scheme at 11 Hz modulation frequency (gray line) applied to the piezo mirror.

Варіація ступеню диспергації агрегованих вуглецевих нанотрубок в розчинах з ПВБ

Кузьменко^a Т.О., Семененко^{b,c,d} М.О., Кравченко^b С.О.

^a*КНУ імені Тараса Шевченка, пр. Глущкова 4-г, 03022 Київ*

^b*Інститут фізики напівпровідників НАН України, пр. Науки 41, 03028 Київ*

^c*Інститут фізики НАН України, пр. Науки 46, 03028. Київ*

^d*КПІ ім. Ігоря Сікорського, пр. Берестейський 37, 03056 Київ*

Вуглецеві нанотрубки (ВНТ) є 3D-наноструктурами, які формуються з шару графену, що скручується навколо однієї вісі, утворюючи, в залежності від кількості шарів, одно- або багатошарові (ОШ(БШ)-ВНТ). ВНТ мають унікальні механічні та електронні властивості завдяки ковалентно-зв'язаних sp^2 -гібридизованих атомів вуглецю по типу ароматичних конденсованих циклів. Диспергування ВНТ в лабораторних та промислових умовах здійснюється ультразвуковою обробкою, у вібраційних млинах або гідродинамічних дезінтеграторах. Відомо, що основною причиною агрегації ВНТ є вандер-ваальсьова взаємодія між сусідніми ВНТ, тому для зменшення ступеню агрегації, при приготуванні гомогенних дисперсій за допомогою ультразвуку, використовують поверхнево-активні речовини (ПАР). Гомогенність отриманих дисперсних композицій перевіряється шляхом моніторингу з використанням методу динамічного розсіювання світла (DLS). Провідність у таких структурах переважно залежить від концентрації ВНТ, рівномірності їх розподілу та здатності утворювати переколяційну мережу. Збільшення концентрації ВНТ до рівня вище порогу переколяції є ключовим для отримання стабільно електропровідної системи. На відміну від ОШ-ВНТ, БШ-ВНТ характеризуються визначеними труднощами у приготуванні дисперсних розчинів, навіть з використанням ультразвукової обробки на протязі 3 годин ці дисперсії залишаються сильно агрегованими. Проте, використання полівінілбутираді (ПВБ), при приготуванні дисперсій БШ-ВНТ у відповідних розчинниках призводить до збільшення ступеню диспергації агрегованих ВНТ. Крім того, включення нанотрубок у ПВБ-матрицю дозволяє змінювати електропровідність плівок на його основі, зберігаючи при цьому притаманним йому гнучкості та механічної міцності. Слід також зауважити, що ПВБ характеризується високою прозорістю, сильною адгезією до поверхонь, стійкістю до ультрафіолетового випромінювання, ударостійкістю та здатністю зберігати функціональні властивості в умовах екстремальних температур. Полімерний ланцюг ПВБ містить як гідрофобні, так і гідрофільні фрагменти, що дозволяють йому бути розчинним як в полярних, так і в неполярних органічних розчинниках. Розчинність

залежить від молекулярної маси полімеру, його складу та відносного вмісту відповідних фрагментів.

Основний акцент представленого дослідження був спрямований на визначений підбір розчинників, що використовуються для приготування дисперсних розчинів сильно агрегованих БШ-ВНТ на основі шкали співвідношення гідрофобності-гідрофільноті розчинників та їх дипольного моменту. На рис. 1 показано розподіли БШ-ВНТ за розмірами, розчинених у циклогексаноні та пропіловому спирті. Як видно з рис. 1а, розподіл розмірів дисперсії БШ-ВНТ в циклогексаноні коливається від 30 до 300 нм з чітко вираженим піком при 145 нм, з додатковим зсувом піку в бік більшої диспергованості агрегованих ВНТ (100 нм). Диспергування ВНТ у пропіловому спирті (рис. 1б) призводить до зміщення розподілу розмірів у бік більших значень (збільшення агрегації): 100 - 3000 нм з чітко вираженим піком при 920 нм. Таким чином, приготування дисперсій БШ-ВНТ у циклогексаноні призводить до збільшення ступеню диспергування агломерованих ВНТ, забезпечуючи компактний розподіл частинок, в той час як у спостерігається тенденція до зменшення ступеню дисперсності ВНТ.

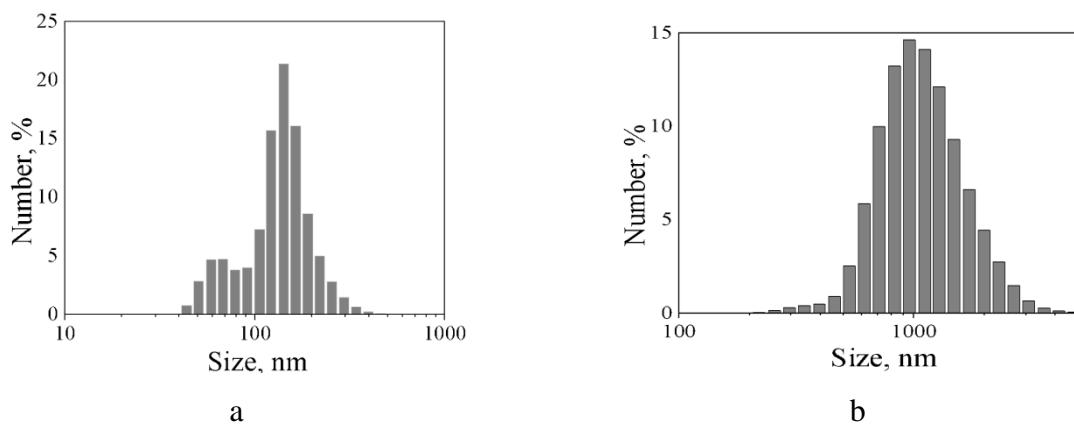


Рис. 1. DLC розподіл агрегованих ВНТ при приготуванні дисперсій в (а) циклогексаноні та (б) пропіловому спирті.

Дисперсія БШ-ВНТ в циклогексаноні забезпечує більш стабільний та компактний розподіл в матриці ПВБ. Отримані результати відкривають можливість створення гнучких електропровідних матеріалів із контролюваними властивостями на основі ВНТ і ПВБ.

Застосування моделей комп’ютерного зору до оцінки концентрації заліза у кремнієвих сонячних елементах

О. В. Завгородній, О. Я. Оліх

Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
Україна, 01601, місто Київ, вул. Володимирська, 64/13
nevermor464@gmail.com, olegolikh@knu.ua

Штучний інтелект знаходить все більше застосування у різноманітних галузях фізики напівпровідників, включно із вирішенням завдань, пов’язаних із характеризацією дефектів [1]. Проте однією з проблем ефективного застосування подібних методів є необхідність значної кількості даних для тренування відповідних моделей. Як правило, отримати з експерименту необхідний обсяг даних практично неможливо і тому застосовують моделювання (що нерідко є дуже вимогливим з точки зору часових та розрахункових затрат), Physics-Informed Neural Networks (які передбачають використання фізичних законів у функції втрат і дозволяють генерувати дані) чи Transfer Learning (коли модель, навчена на одній задачі, використовується для розв’язання іншої, пов’язаної задачі).

З іншого боку, задача комп’ютерного зору є однією з класичних проблем машинного навчання. Існують величезні набори даних, які дозволяють якісно навчати відповідні моделі, що, в свою чергу, перебувають у вільному доступі. Метою цієї роботи є дослідження можливості використання моделей класифікації зображень (на прикладі EfficientNetB7, що містить ~66 млн. параметрів, навчалася на ~1.2 млн зображень) до вирішення фізичних задач (визначення концентрації домішкового заліза N_{Fe} у кремнієвих сонячних елементах КСЕ).

Один з методів оцінки N_{Fe} базується на вивченні кінетики релаксації струму короткого замикання I_{SC} після розпаду пар залізо-бор[2]. В роботі

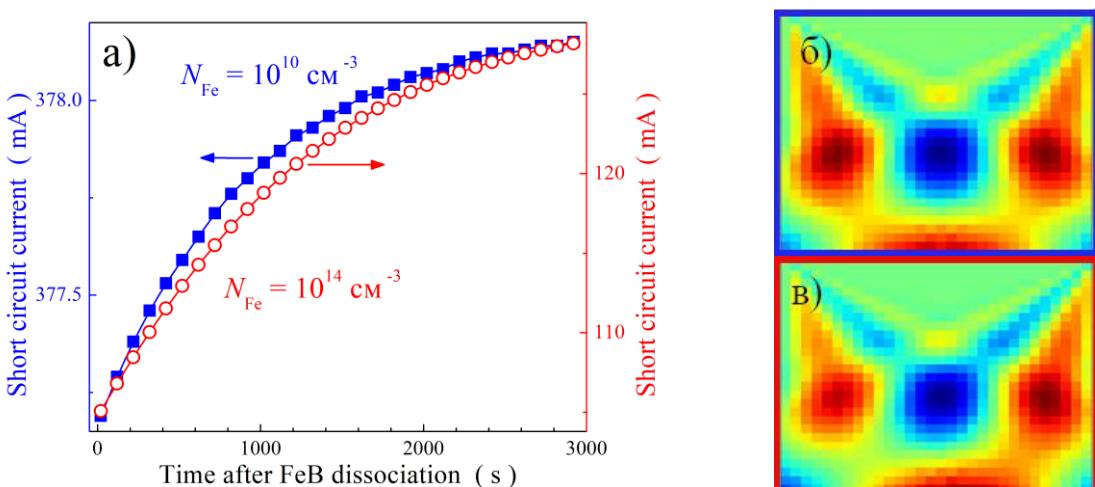


Рис. 1. Змоделювані для температури 340 К залежності $I_{\text{SC}}(t)$ (а) для КСЕ з концентрацією бору в базі $N_{\text{B}} = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ та відповідні вейвлет спектрограми

(б, в). N_{Fe} , cm^{-3} : 10^{10} (квадрати, б), 10^{10} (кола, в).

подібні залежності $I_{\text{SC}}(t)$ були змодельовані для КСЕ з певним ступенем легування бази N_B та різною концентрацією заліза за допомогою програмного пакету SCAPS – див. рис.1,а. Особливості моделювання описані в [3]. Застосування до $I_{\text{SC}}(t)$ вейвлет перетворення Морле дозволило отримати спектrogramу у вигляді двовимірного зображення, кожна точка якого відповідає амплітуді вейвлет коефіцієнта для певних моменту часу та частоти (рис.1,б-в). Зображення використовувалися як вхідні дані для EfficientNetB7, вихідні коефіцієнти якої (ймовірності того, що картина належить до кожного з 1000 класів) оброблювалися регресійною глибокою нейронною мережею (ГНМ), безпосередньо орієнтованою на визначення N_{Fe} . ГНМ складалася з 3 схованих шарів, використовувала активаційну функцію ReLu та оптимізатор Adam. Для навчання ГНМ проводилося моделювання залежностей $I_{\text{SC}}(t)$, які відповідали всього 25 різним значенням N_{Fe} , рівномірно розподіленим у логарифмічному масштабі в діапазоні 10^{10} - 10^{14} cm^{-3} . Під час навчання проводилася аугментація зображень з використанням поворотів та відзеркалень. Для тестування використовувалися дані, отримані в результаті моделювання, проведеного для значень концентрацій заліза, відмінних від тренувального набору. Результати для двох КСЕ з різною концентрацією бору представлені на Рис.2. Середня похибка прогнозів становить близько 16%, коефіцієнт детермінації R^2 – до 0,98. Зважаючи на надзвичайно малий розмір тренувального набору, отримані результати свідчать про значний потенціал Transfer Learning з використанням вейвлет-перетворень та моделей комп’ютерного зору для вирішення задач фізики напівпровідників.

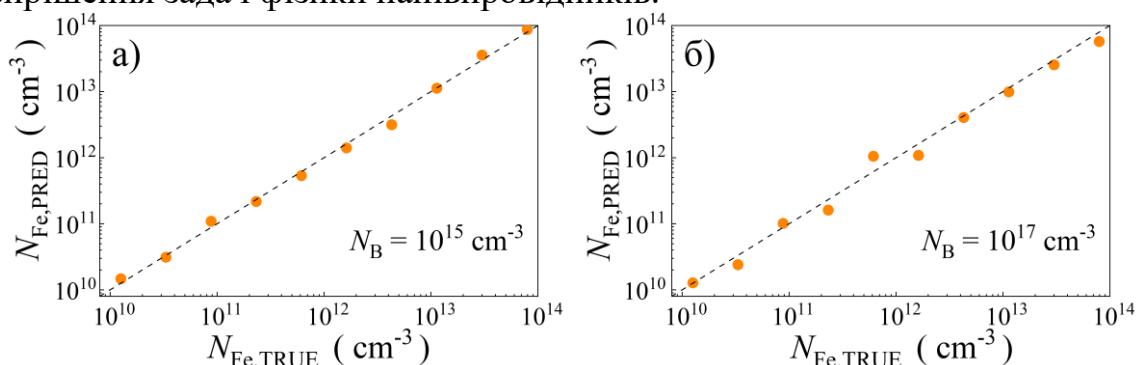


Рис.2. Співвідношення між передбаченими $N_{\text{Fe},\text{PRED}}$ та істинними $N_{\text{Fe},\text{TRUE}}$ значеннями концентрації заліза для тестового набору. N_B , cm^{-3} : 10^{15} (а), 10^{17} (б). Пунктирна лінія – пряма істинності, наведена для зручності

О.О. висловлює подяку за фінансову підтримку роботи Національному фонду досліджень України (проект № 2023.03/0252).

- [1] S. Wang *et al.* Sol. Energy Mater. Sol. Cells **277**, 113123 (2024)
- [2] O. Olikh, V. Kostylyov *et al.* J. Appl. Phys. **130**, 235703 (2021)
- [3] O. Olikh, O. Zavhorodnii. Mater. Sci. Eng. B. **317**, 118192 (2025)

Халькогенідні матеріали з керованими рекомбінаційними властивостями для адаптивних фотонних технологій

Замуруєва О. В., Сахнюк В. Є., Івановський Ю. В., Романчук О. М.

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

До фотонних пристрій належать: світлодіоди, які здійснюють перетворення електричної енергії в світлове випромінювання; фотодетектори, що реєструють світлові сигнали шляхом ініціювання електронних процесів під дією оптичного збудження; а також фотовольтаїчні елементи, включаючи сонячні батареї, які генерують електричну енергію за рахунок поглинання світла.

У сучасних оптоелектронних технологіях гостро постає необхідність у матеріалах, які дозволяють адаптивно керувати електронною та фотонною поведінкою систем. Кристалічні сполуки системи $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ ($Tl_{1-x}In_{1-x}D^{IV}_xSe_2$ ($D^{IV} = Si, Ge, Sn$)) поєднують у собі широкі можливості зонної інженерії, високі показники фоточутливості та структурну гнучкість. Їхня здатність до формування як прямих, так і непрямих міжзонних переходів, дозволяє створювати матеріали з необхідною спектральною характеристикою в діапазоні 0,66–1,1 мкм.

При кімнатній температурі для кристалів $Tl_{1-x}In_{1-x}D^{IV}_xSe_2$ ($D^{IV} = Si, Ge, Sn, x \leq 0,25$) залежності $\alpha = f(h\nu)$ мають складний характер [1, 2]. Також, із зростанням x (збільшенням умісту $D^{IV}Se_2$ ($D^{IV} = Si, Ge, Sn$)) край смуги фундаментального поглинання зміщується в область більших енергій. Таке зміщення зумовлене двома процесами [3]: статичним заміщенням атомів індію атомами кремнію (чи германію, олова) і збільшенням концентрації вакансій талію V_{Tl} .

Підбір молярного складу компонентів системи дає змогу точно керувати шириною забороненої зони, яка змінюється від 1,1 до 1,8 еВ. При низьких концентраціях D^{IV} -компонент ($x < 0,1$) переважають прямі переходи, що забезпечує високу ефективність світловипромінювання. При збільшенні x проявляється непрямий характер переходу, однак введення ізоелектронних домішок дозволяє суттєво підвищити ймовірність рекомбінаційних процесів шляхом формування локалізованих пасток біля зони провідності.

Для $0 \leq x < 0,1$ усі досліджувані напівпровідники є прямозонними, при $x \geq 0,1$ енергетична щілина є непряма і збільшується наступним чином:

Сполуки	$0 \leq x < 0,1$	E_g, eV	$x \geq 0,1$	E_g, eV
$Tl_{1-x}In_{1-x}Si_xSe_2$		1,53		1,73

Tl _{1-x} In _{1-x} Ge _x Se ₂		1,56		1,58
Tl _{1-x} In _{1-x} Sn _x Se ₂		1,42		1,64

Енергетична структура напівпровідникових матеріалів може включати два типи мінімумів у зоні провідності — прямий та непрямий. У випадку прямого мінімуму, розташованого на одному рівні імпульсу з максимумом валентної зони, електрони та дірки мають однакові імпульси. Для TlInSe₂, Tl_{1-x}In_xSi_xSe₂, Tl_{1-x}In_xGe_xSe₂ і Tl_{1-x}In_xSn_xSe₂ ($x < 0,1$) це забезпечує високу ймовірність міжзонних переходів без необхідності застосування додаткових процесів, таких як розсіювання фононами. У таких матеріалах фотон, що виникає в результаті рекомбінації, має енергію, близьку до ширини забороненої зони, а сам процес випромінювання є основним.

Натомість у структурах з непрямим мінімумом зони провідності імпульс електрона не збігається з імпульсом дірки, для сполук при $x \geq 0,1$. Відповідно, міжзонні переходи вимагають участі фононів або інших механізмів розсіювання для збереження імпульсу. Через це ймовірність таких переходів значно знижується, а ефективність випромінювальної рекомбінації є низькою. Щоб компенсувати цю особливість, у таких матеріалах створюють спеціальні рекомбінаційні центри, які сприяють підвищенню ймовірності випромінювальних процесів.

Ефективні центри випромінювальної рекомбінації можуть формуватися внаслідок введення спеціальних домішок. Заміщення атомів у вузлах кристалічної решітки, зокрема елементів IV групи, атомами вуглецю створює умови для появи електронних пасток поблизу зони провідності. Неважаючи на схожість зовнішньої електронної конфігурації таких елементів, відмінності у внутрішніх оболонках спричиняють локалізацію електрона і формування так званого ізоелектронного центра.

Ці центри, будучи нейтральними у вихідному стані, захоплюють інжектовані електрони, які згодом притягують дірки з валентної зони. Це веде до утворення зв'язаних електронно-діркових пар — екситонів. При їх анігіляції випромінюється фотон, енергія якого визначається як різниця між шириною забороненої зони та енергією зв'язку центра. Подібна схема рекомбінації дозволяє значно підвищити ймовірність випромінювальних переходів завдяки перетворенню квазіімпульсу, що зберігає закон збереження імпульсу. Такий механізм є переважаючим у матеріалах з непрямою зоною провідності.

- [1] 1. G.E. Davydyuk, O.Y. Khyzhun , A.H. Reshak, et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 15, 6965 (2013).
- [2] G.E. Davydyuk, M. Piasecki , O.V. Parasyuk, et al., Opt. Mater. 35(12), 2514 (2013).
- [3] M. Piasecki, G.L. Myronchuk, O.V. Zamurueva, et al. Huge Operation by Energy Gap of Novel Narrow Band Gap Tl_{1-x}In_{1-x}B_xSe₂ (B=Si, Ge): DFT, X-ray Emission and Photoconductivity Studies. Mater. Res. Express, 3(2), 025902 (2016).

Characterization of $(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}\text{M}_x$ ($\text{M}=\text{Ag}, \text{Bi}$) glasses by DC conductivity

**Voynarovych I.M.¹, Pogodin A.I.², Hasynets S.M.¹, Pavley S.I.¹,
Gomonnai A.V.¹**

¹*Institute of Electron Physics, Nat. Acad. Sci. Ukr., Universytetska Str. 21, Uzhhorod, 88017,
Ukraine.*

²*Uzhhorod National University, 46 Pidhirna Str., 88000, Uzhhorod, Ukraine
E-mail: voynar@ukr.net*

The chalcogenide glasses are very interesting since these materials exhibit transparency in the near and mid-infrared region, high linear and nonlinear refractive index, optical memory and photodarkening. Generally, the undoped chalcogenide glasses show low values of electrical conductivity, which means a serious limit to their technological applications and to the electrical measurements. The addition of metals into these amorphous materials, even at very low concentrations, leads to a significant increase in their electrical conductivities. Furthermore, the use of various techniques such as laser ablation, diffusion-limited growth in metal-chalcogenide composites can lead to the formation metal-chalcogenide nanocrystals embedded in a chalcogenide glass matrix, which can be promising materials in optics, electronics, optoelectronics, and materials science due to unique properties [1].

Glasses of the $(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}\text{M}_x$ ($\text{M} = \text{Ag}$: $x = 0.04, 0.1, 0.15, 0.2$; Bi : $x = 0.03, 0.4, 0.5, 0.6$ respectively) system were prepared from pure components As_2S_3 and Bi or Ag by conventional melt quenching technique. DC-conductivity was measured in the temperature range 290 K to 410 K

The nanocrystals of bismuth sulfide were formed by recrystallizing of rapidly quenched composite glasses under different temperature-time (220–280°C, 1–5 hour) annealing regimes. X-ray diffraction studies of annealed As_2S_3 – Bi composites revealed a crystalline phase of bismuth sulfide. The dimensions of the crystalline phase estimated from X-ray diffractograms according to Scherrer's equation were 20–60 nm.

Increasing concentration of bismuth and silver lead to an increase in specific conductivity $10\text{--}10^3 \text{ S/m}$ depending on metal concentration, and decrease in activation energy from 1.2 eV for As_2S_3 to 0.78 eV for $(\text{As}_2\text{S}_3)_{0.8}\text{Ag}_{0.2}$ and 0.95 eV for $(\text{As}_2\text{S}_3)_{0.94}\text{Bi}_{0.06}$. Recrystallization of bismuth-containing composites leads to a sharp increase in specific conductivity, and a decrease in activation energy that can be explained within the framework of the model of micro-inhomogeneous conductivity or by the percolation mechanism, in which the increase in conductivity is associated with the overlapping of space charge regions that arise at the matrix-nanocrystalline boundary.

This work was supported by the “Advanced Science in Ukraine” grant No. 2023.03/0013 from National Research Foundation of Ukraine.

[1] K. Tanaka, K. Shimakawa. Amorphous Chalcogenide Semiconductors and Related Materials (Springer, 2021).

Вплив магнітного поля на гістерезис вольт-амперних характеристик у кремнієвих n^{++} - p^+ -діодах при температурі рідкого гелію

Шварц М. М., Шварц Ю. М., Беляєв О.Є., Соколов В. М.

*Інститут фізики напівпровідників імені В.С. Лашкарьова НАН України,
03028, Україна, м. Київ*

Дослідженням ефектів перемикання присвячено велику кількість робіт, результати яких докладно викладені у монографіях та оглядах [напр., 1-2]. Цей ефект полягає в швидкому та обертоному переході, що важливо для практичних застосувань, з високоомного (ВО) стану в низькоомний (НО) стан. Велика кількість циклів переходів з ВО в НО стан і назад давало можливість говорити про перспективне застосування таких перемикачів в мікроелектроніці.

Дискусія про механізм ефекту перемикання, який, як вважається, є першою стадією ефекту пам'яті, продовжується досі. У той же час дослідники зазначають, що причини та умови, що призводять до бістабільності на ВАХ, можуть відрізнятися для різних приладів. Всі ці пристрой демонструють принаймні два стійкі стани з різною провідністю при заданій напрузі.

У даній роботі експериментально досліджено ефекти перемикання на вольт-амперних характеристиках (ВАХ) кремнієвих n^{++} - p^+ -діодів при температурі рідкого гелію. Наведено результати досліджень впливу магнітного поля та ефекту ВКЛ-ВИКЛ магнітного поля на гістерезис ВАХ.

Досліджені у роботі діоди з n^{++} - p^+ -переходом виготовлені на базі промислової планарної дифузійної технології кремнієвих діодних чіпів. Поверхнева концентрація легуючої домішки фосфору в емітері становила $6 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$, а бору в базі діода - $3 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Ступінь компенсації $K \approx 0.03$.

Вимірювання прямих ВАХ діодів при температурі рідкого гелію в режимах розгорнення струму і напруги виконані на автоматизованому стенду. Похибка вимірювання напруги $\pm 5 \text{ мкВ}$, а струму $\pm 5 \%$. До досліджуваного зразка прикладалося постійне магнітне поле до 3.1 кЕ.

При деякому пороговому значенні прикладеної напруги відбувається швидке перемикання зі стану ВО в провідний НО стан, яке супроводжується появою S-подібної ВАХ і наявністю гістерезису. Амплітуда стрибка струму становить ~ 2.5 порядку. Ширина петлі $\approx 0.3 \text{ В}$.

На Рис. 1 (a, b) петля гістерезису при відсутності магнітного поля $H=0$ позначена точками ABCD. Під впливом прикладеного магнітного поля величиною $H=3.1 \text{ кЕ}$ амплітуда петлі зменшується приблизно на порядок і ширина петлі гістерезису зменшується до 0.1 В, і вона набуває

вигляду, позначений точками AB'C'D'. Після проходження гістерезисної петлі AB'C'D' при $H=3.1$ кЕ ми відключаемо магнітне поле в точці Е, що знаходиться на гілці стану ВО (Рис.1а). При цьому відбувається швидке перемикання діода в стан НО для $H = 0$ (точка F). Подальше зменшення напруги на діоді призводить до проходу по частині петлі при $H=0$ - EFCD. Якщо ж вимкнути магнітне поле в точці Е, що відповідає стану НО в магнітному полі, відбувається переключення у вихідний стан НО по кривій EFCD (Рис.1 б).

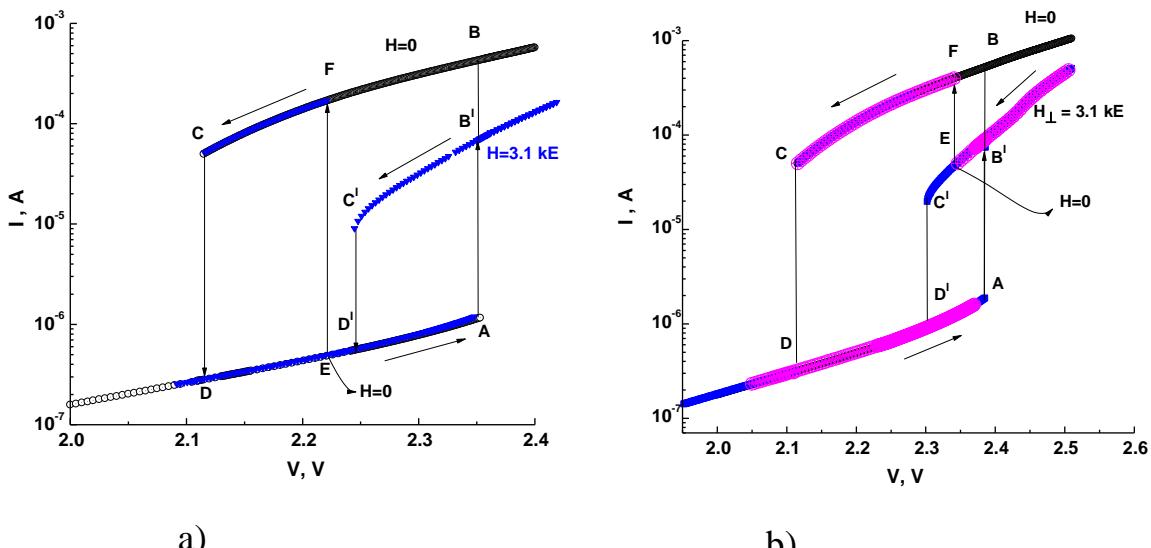


Рис.1а, б. Влияние включения и выключения магнитного поля на петлю гистерезиса в диоде.

Таким чином, незалежно від того в якому стані (ВО або НО) знаходиться діод в магнітному полі, в момент виключення магнітного поля відбувається перемикання на вихідну (за відсутності магнітного поля) гілку НО. Показано вплив орієнтації діода в магнітному полі на амплітуду та ширину гістерезисної петлі. На ВО стан вплив магнітного поля практично відсутній. На НО стан поля перпендикулярної орієнтації надає сильніший вплив, ніж паралельної. Вплив на амплітуду та звуження петлі збільшується зі зростанням величини прикладеного магнітного поля. Розглянуто можливі механізми виявленого ефекту.

1. M.P. Shaw, V.V. Mitin, E. Schöll, H. L. Grubin. The Physics of Instabilities in Solid State Electron Devices, Springer Science & Business Media, 2013. - 468 p. doi:10.1007/978-1-4899-2344-8.
2. D. Adler, H.K. Henisch, N. Mott. The mechanism of threshold switching in amorphous alloys. Rev. Mod. Phys. 50, 209 (1978) doi: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.50.209>.

Work function of secondary electrons from CuAlMg alloy

S. Karpus^{1,3}, M. Liashchov^{2,4}, I. Shliakhov³, D. Zakharchuk¹

¹Lutsk National Technical University, Lutsk, 75 Lvivska St.

²Kharkiv National University, Kharkiv, 4 Svobody Square

³National Science Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology",
Kharkiv, 1 Akademichna St.

⁴Institute of Electronic Physics, Uzhhorod, 21 Universytetska St.

When studying the phenomenon of secondary electron emission from materials, an important characteristic of the process is not only the secondary emission coefficient as a result of thermal or radiation-stimulated influence, but also the energy spectra of secondary electrons and the value of their work function taking into account the properties of the material (chemical composition, amorphous or single-crystalline, the presence of an oxide layer, etc.). Knowledge of the emission properties of materials allows for optimizing the modes of secondary electron emission used as thermal cathodes and predicting their operating parameters. This is important in the design of electrical vacuum devices, the effective operation of charged particle accelerators, the prediction of stable operation of micro- and nanoelectronic components under conditions of radiation and thermal load, etc.

The results of the analysis of the work function of secondary electrons from the Cu(93%)Al(6%)Mg(1%) alloy based on the current-voltage characteristics (I-V) obtained in [1] are presented. The proposed method for determining secondary emission yields allows for studying their dependence on the heating temperature of the samples and the effect of irradiation with an electron beam with an energy of up to 600 eV in situ. The use of a spherical electrostatic analyzer made it possible to obtain and study the I-V characteristic, consisting of two sections: the retarding potential (-50...0) V and the extraction potential (0...100) V. The experimentally obtained I-V characteristic at temperatures of 293 K (Fig. 1a), 522 K, 622 K and 672 K during pretreatment [2] is presented in the form of a dependence of $\ln(I)$ on $U^{0.5}$ (Fig. 1b and 1c, where I is the emission current, U is the collector potential), from which the voltage value corresponding to the linear sections of the dependence of $\ln(I)$ on $U^{0.5}$ was found graphically. The analysis results and the work function values are presented in Table 1.

According to the presented data (Fig. 1b and 1c) and the obtained work function values for three linear sections (1, 2, 3) of the dependence of $\ln(I)$ on $U^{0.5}$, it follows that when CuAlMg samples are irradiated by electrons, which have an inhomogeneous distribution of elements over the surface and in the volume (the influence of the oxide layer on the surface should also be taken into account), an increase in the work function value is observed with increasing temperature.

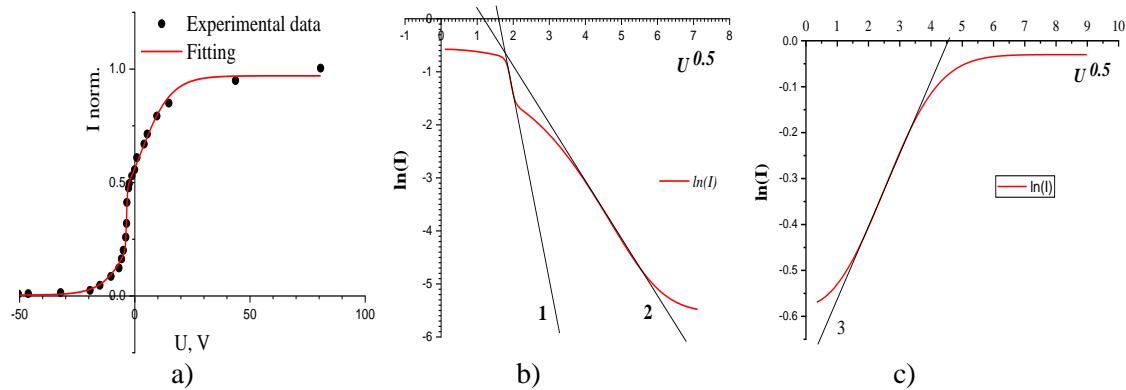


Fig. 1. Example of I-V characteristic (a) and dependence of the influence of the external field at the retarding potentials (b) and extraction (c) on the emission current at $T=293$ K.

Table 1. Work function of secondary electrons from CuAlMg for three regions of the I-V characteristic depending on temperature sample.

Temperature, K	ϕ (-50...0), eV (1)	ϕ (-50...0), eV (2)	ϕ (0...100), eV (3)
293	2.43	1.34	20.6
523	3.96	3	6
623	4.92	3.76	5.74
673	5.56	5.76	--

Taking into account the Ref. data on secondary electron emission coefficients [3], for polycrystals: Cu $\phi=3.32-5.5$ eV, Al: $\phi=2.98-4.69$ eV Mg: $\phi=2.7-3.905$ eV, for oxides MgO: 2.73-3.3 eV, Al_2O_3 : 2.86-8 eV, Cu_2O : 4.9-5.15 eV; CuO: 1.8-5.34 eV and CuMg: 3.7-3.8 eV it follows that in the region of the retarding potential, linear section 2 corresponds to copper oxide (it should be noted that the Cu content is 93% and the linear section is the longest), and linear section 1 - to aluminum oxide (Al content is 6%). In the region of electron extraction at room temperature, a space charge region is formed near the sample surface, which completely decreases when the temperature increases to 673 K.

1. V. L. Borisov, V. N. Lepeshinska "Secondary emission properties of magnesium and beryllium alloy emitters after short-term activation": Science. manual: M.: "Izvestiia Academy of Sciences of the USSR", 1958, vol. XXII, No. 5, p. 534-545.

2. М. Ляшов, С. Карпуш, О. Шопен, Є. Цяцько. Спектральні характеристики термостимулюваних вторинних емісійних електронів зі сплаву Cu-Al-Mg // Proceedings of the scientific works of the international conference Nuclear Physics in Transcarpathia (to the 55th anniversary of the Department of Photonuclear Processes of the IEP of the NAS of Ukraine) May 21-23. 2024 p. 172.

3. Fomenko V.S. Emission properties of materials. Handbook, K., "Naukova Dumka", 1981.

МОДЕЛЮВАННЯ ПОЛЯРНИХ ТА ДІЕЛЕКТРИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОЧАСТИНОК МУЛЬТИФЕРОЇКІВ $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ ТА CuInP_2S_6

Колупаєв В.О., Морозовська Г.М., Порошин В.М.

Інститут Фізики НАН України, 03028, проспект Науки 46, Київ, Україна

Нанорозмірні мультифериоки з розмірами від кількох до сотні нанометрів та різними параметрами форми є базовими модельними об'єктами для вивчення полярного, антиполярного та магнітного дальнього порядку, а також магнітоелектричної взаємодії. Оксид вісмуту-самарію ($\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$) та гексаметадифосфат міді-індію (CuInP_2S_6) є класичними мультифериоками, полярні та магнітні властивості яких достатньо вивчені як для об'ємних, так і для тонкоплівкових зразків.

Однак властивості наночастинок $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ та CuInP_2S_6 вивчені значно менше теоретично та експериментально [1], хоча вони можуть бути використані для накопичення [2] та зберігання енергії [3], а також для створення сучасних пристрій FeRAM [4]. Зокрема, наночастинки CuInP_2S_6 можуть становити особливий інтерес для застосування для зберігання енергії [5], запам'ятовуючих пристроях [6] та польових транзисторах з негативною ємністю [7].

У цій роботі буде представлено фазові діаграми в залежності від розмірів і параметрів форми наночастинок $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$, та CuInP_2S_6 , а також фазові діаграми залежності від частки самарію в твердому розчині $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ побудовані на основі комп'ютерного моделювання діелектричних і магнітоелектричних властивостей наночастинок $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ та дослідження індукованих напруженням трансформацій перемикання поляризації в сегнетоелектричних наночастинках CuInP_2S_6 для трьох різних форм: диск, сфера та голка, в рамках підходу Гінзбурга-Ландау-Девоншира.

Результати дослідження, представлені в даній роботі, дозволять краще зрозуміти властивості нанопорошків мультиферроїків, що в подальшому дасть змогу створювати інноваційні нанорозмірні мультифериоки з покращеними та/або керованими властивостями, а також розширити перспективи їх застосування в наноелектроніці, накопичувачах енергії, та запам'ятовуючих пристроях.

Робота підтримана цільовою програмою Національної академії наук України, проект № 5.8/25-П «Енергозберігаючі та екологічно

безпечні нанорозмірні фероїки для розвитку сенсорики, наноелектроніки та спінtronіки».

- [1] A. N. Morozovska, E. A. Eliseev, I. V. Fesych, Y. O. Zagorodniy, O. S. Pylypchuk, E. V. Leonenko, et al. Reentrant polar phase induced by the ferro-ionic coupling in $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ nanoparticles, *Physical Review B*, 110, 224110 (2024), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.110.224110>.
- [2] S. Chaturvedi, S.K. Singh, P. Shyam, M.M. Shirolkar, S. Krishna, R. Boomishankar, et al., Nanoscale LuFeO_3 : Shape dependent ortho/hexa-phase constitution and Nanogenerator Application, *Nanoscale*. 10 (2018). <https://doi.org/10.1039/c8nr07825d>.
- [3] Z. Fan, S. Gao, Y. Chang, D. Wang, X. Zhang, H. Huang, et al., Ultra-superior high-temperature energy storage properties in polymer nanocomposites via rational design of core–shell structured inorganic antiferroelectric fillers, *Journal of Materials Chemistry A*. 11 (2023). <https://doi.org/10.1039/d2ta09658g>.
- [4] L. Baudry, I. Lukyanchuk, V.M. Vinokur, Ferroelectric symmetry-protected multibit memory cell, *Scientific Reports*. 7 (2017). <https://doi.org/10.1038/srep42196>.
- [5] Y. Zhang et al., “Ferroelectric polarization-enhanced performance of flexible CuInP_2S_6 piezoelectric nanogenerator for biomechanical energy harvesting and voice recognition applications,” *Advanced Functional Materials*, vol. 33, no. 26, Mar. 2023. doi:10.1002/adfm.202214745
- [6] Y. Wu, N. T. Duong, Y. Chien, S. Liu, and K. Ang, “A dynamic memory for reservoir computing utilizing ion migration in CuInP_2S_6 ,” *Advanced Electronic Materials*, vol. 10, no. 1, Dec. 2023. doi:10.1002/aelm.202300481
- [7] A. N. Morozovska, E. A. Eliseev, Y. M. Vysochanskii, S. V. Kalinin, and M. V. Strikha, “Size effect of negative capacitance state and subthreshold swing in van der waals ferrielectric field-effect transistors,” *Advanced Electronic Materials*, vol. 11, no. 4, Oct. 2024. doi:10.1002/aelm.202400495

COMPREHENSIVE COMPARISON OF ENERGETIC, MECHANICAL, AND OPTICAL CHARACTERISTICS OF β -InSe, ε -InSe, AND γ -InSe POLYTYPES FOR ADVANCED OPTOELECTRONIC APPLICATIONS

O.I. Korolov, L.Yu. Kharkhalis, K.E. Glukhov, T.Ya. Babuka

Institute for Physics and Chemistry of Solid State, Uzhhorod National University, 54

Voloshin St., Uzhhorod, 88000, Ukraine

oleh.korolov@uzhnu.edu.ua

Indium selenide (InSe) crystals belong to the class of layered semiconductors characterized by different polytypes and exhibit unique characteristics that make them suitable for high-efficiency microelectronic and optoelectronic devices. Due to the high mobility of charge carriers, these crystals can be proposed for creating field-effect transistors, cells for solar batteries and photodetectors. Later investigations support the realization of the pressure-induced superconductivity in γ -InSe single crystal [1], and the ferroelectricity phenomena in the β -InSe nanoflakes [2] that discovers their new possibility of the great technological potential. Also, these materials with the two-dimensional (2D) structure are widely used for the formation of nanosheets and heterostructures (β -InSe/graphene, InSe/Si, InSe/InP, and InSe/In₄Se₃, InSe/MoSe₂) for the development of new semiconductor devices in the range of nanoelectronics [3]. To identify the most stable stacking of the van der Waals lattice of the heterostructures based on InSe, it is of primary importance to investigate the physical properties of all structural phases of this crystal, since the geometry of the crystalline polytypes of InSe can directly influence their electronic, optical, and mechanical characteristics. Such a study is significant for constructing novel heterostructures to optimize their electronic properties and promote mechanical stability.

As it is known, the various polytypes of indium selenide possess different stoichiometries, depending on the arrangements of atoms and the stacking layers. For example, β -InSe and ε -InSe polytypes crystallize in a hexagonal lattice, and γ -InSe features a rhombohedral structure. Here, we report a comprehensive comparison of the electronic, mechanical, and optical properties of the three modifications considered in indium selenide.

The first-principles calculations of the band structures, spatial distribution of the electron density, and total and partial densities of states for the structural modifications of indium selenide have been performed. It was obtained that the β -InSe and γ -InSe bulk crystals demonstrate the direct band gap (at the Γ and Z points in the Brillouin zone, respectively). At the same time, the ε -InSe polytype shows the indirect band gap. Mulliken charges analysis supports the distinct variations of their redistribution across the polytypes that can be attributed to the specialty of the crystallographic

arrangements and provides a detailed understanding of the electronic distribution and bonding characteristics within β -InSe, ε -InSe, and γ -InSe.

The energy dependencies of dielectric functions and refractive indices of the three InSe modifications across different polarizations along crystal axes are calculated too. In Table 1, these static characteristics are presented.

Table 1
Calculated dielectric functions and refractive indices of the InSe polytypes for different polarizations

Comparison	β -InSe	ε -InSe	γ -InSe
$\epsilon_1 E \parallel x(y)$	9,94	9.17	11.59
$\epsilon_1 E \parallel z$	9,91	8.08	11.59
$n E \parallel x(y)$	3,15	3.03	3.40
$n E \parallel z$	3,14	2.84	3.40

For β -InSe and ε -InSe modifications, significant variations with anisotropy character in optical characteristics depending on photon energy are observed. At the same time, γ -InSe exhibits isotropic dielectric function and refractive indices behavior, making it ideal for applications demanding consistent properties. Figure 1 demonstrates the absorption coefficients versus energy.

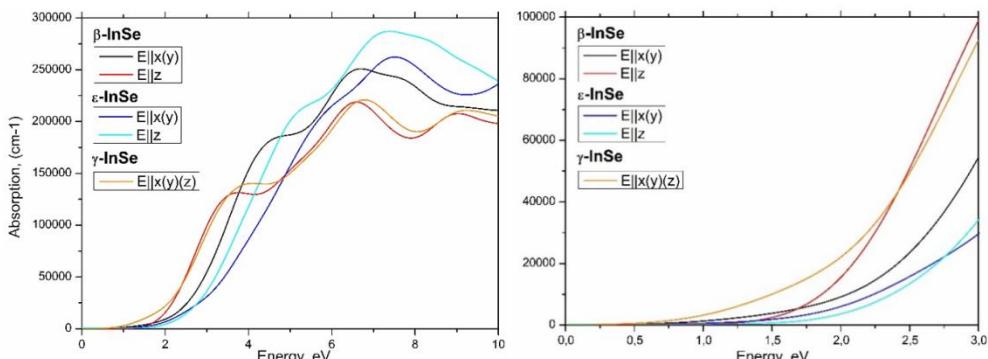


Fig.1. The absorption coefficient vs photon energy for InSe in different modifications

Mechanical characteristics (elastic moduli, Young's moduli, Poisson's ratios) were also calculated for the β -InSe, ε -InSe, and γ -InSe bulk crystals. Analysis of these characteristics and the B/G ratio, an indicator of ductility, shows that γ -InSe and β -InSe have closer values than ε -InSe.

Thus, carried-out investigations for the indium selenides in the different structural polytypes can have a broad interest in promoting profitable properties, mechanical stability, and specific applications of selected materials in optoelectronics, photonics, and semiconductor devices.

- [1] Sh. Liu, Ye Yang, F. Yu, [et al.], Physical Review, **105**, 214506 (2022).
- [2] H. Hu, Yi. Sun, M. Chai, [et al.], Appl. Phys. Lett. 114, 252903 (2019).
- [3] S.H. Wang, [et al.], Nanomaterials 9 (1), 82 (2019)

Аналіз можливостей прямого лазерного запису з створення структур з субмікронними розмірами

А.А. Крючин, В.В. Петров, Є.В. Беляк, І.В. Косяк

Інститут проблем реєстрації інформації Національної академії наук України

Технологія прямого лазерного запису (Direct Laser Writing, DLW), як методика безмаскової фотолітографії мікророзмірних і нанорозмірних структур, на сьогоднішній день набуває значного поширення у галузі оптоелектроніки. Зазначається, що відповідна технологія надає широкий інструментарій з виготовлення високоякісних дифракційних оптических елементів (Diffractive Optical Elements, DOE) різних типів і призначення у відповідності до швидкого росту вимог сучасного нанотехнологічного виробництва. При цьому необхідно вказати на важливість дотримання вимог із роздільної здатності та швидкості формування субмікронних структур системою прямого лазерного запису при виготовленні метаповерхонь, які використовуються для керування світловими потоками, як то концентричних кільцевих металінз [1]. При цьому основними перевагами технології прямого лазерного запису є здатність створювати реконфігуровані метаповерхні на основі фоточутливих матеріалів завдяки відсутності необхідності у застосуванні фотошаблону, що дозволяє додатково прискорити процес виготовлення та підвищити якість виготовлених структур. Як показали проведені нами експериментальні дослідження впровадження технології прямого лазерного запису також дозволяє суттєво збільшити роздільну здатність фотолітографічного процесу [2]. На розмір елементів, які формуються в процесі прямого лазерного запису значний вплив мають характеристики лазерного випромінювання, такі як розподіл інтенсивності сфокусованого лазерного променю, швидкість сканування та точність фокусування. Принципове значення для формування субмікронних структур має використання нелінійної взаємодії лазера з фоточутливим матеріалом на основі якого проводиться фотолітографічна процедура. Запис патерну інформаційної структури сфокусованим лазерним променем з неоднорідним розподілом при такій взаємодії дозволяє обійти обмеження у роздільній здатності, які визначаються критерієм Релея [3]. При цьому для досягнення високої точності у записі субмікронних елементів необхідно забезпечити високу точність роботи системи автофокусування лазерного випромінювання. В режимі запису з використання нелінійної взаємодії лазера з фоточутливим матеріалом коливання щільності потужності експонуючого випромінювання приводять до значних змін у розмірі записаних елементів, порушуючи інформаційну структуру.

Також важливим аспектом формування з застосуванням технології прямого лазерного запису патернів інформаційних структур є програмування процесу переміщення сфокусованого лазерного променю або рух підкладки з фоточутливим матеріалом відносно нього. У результаті проведення серії експериментальних досліджень було запропоновано і реалізовано оптимальний варіант прямого лазерного запису растрових оптических структур.

Дискова підкладка в процесі запису дифракційних елементів розміщується на планшайбі – поворотному столі шпинделя і фіксується вакуумною системою. Для забезпечення високої роздільної здатності фотолітографічного процесу було використано шпиндель на аеростатичних опорах, який забезпечує мінімальні радіальні биття. При технології прямого лазерного запису на круговій лазерній записуючій системі, на відміну від технології лазерного запису фотошаблонів в декартових координатах, експонування здійснюється сфокусованим лазерним променем при високих швидкостях сканування у 0,3-0,6 м/с. При виготовленні елемента інформаційної структури підкладка зі світлочутливим матеріалом безперервно обертається, у той час як записуючий промінь повільно рухається у радіальному напрямку від центру до краю відповідно до заданого патерну. Переміщення променю у радіальному напрямку з заданою точністю забезпечує схема управління лінійним приводом позиціонера на основі лазерного цифрового інтерференційного далекоміра з абсолютною відліком координати. Роздільна здатність сформованих радіальних оптичних структур на підкладці методом прямого лазерного запису залежить по осі u від кроку переміщення позиціонера, а по осі x від кількості секторних міток кутового референтного енкодера. Запропонований пристрій прямого лазерного запису дифракційних оптичних елементів, таким чином, дозволяє записувати растрові оптичні структури довільної форми [4]. Значна увага, що придляється розробці та впровадженню методів подальшого збільшення якості патернів інформаційної структури отриманих методом прямого лазерного запису, головним чином спрямована на виправлення округлення кутів і скорочення кінців ліній інформаційних елементів. Для цього використовується контрольована зміна розподілу енергії експонування, що надає можливість покращити зазначені показники [5].

1. Zhao Jin, Yu Lin, Chengmiao Wang, Yeming Han, Bowen Li, Jianyu Zhang, Xin Zhang, Ping Jia, Yueqiang Hu, Qing Liu, Huigao Duan, Jan G. Korvink, Yingchao Li, Huilin Jiang, and Yongbo Deng, "Topologically optimized concentric-nanoring metalens with 1 mm diameter, 0.8 NA and 600 nm imaging resolution in the visible," *Opt. Express* **31**, 10489-10499 (2023) <https://doi.org/10.1364/OE.478680>
2. Petrov V.V., Kryuchyn A.A., Beliak Ie.V., Manko D.Yu., Kosyak I.V., Melnik O.G. Advantages of direct laser writing for enhancing the resolution of diffractive optical element fabrication processes. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2024. V.25, No 3, P. 587-594. DOI: 10.15330/pcss.25.3.587-594.
3. Wang, Shu & Zhou, Zhican & Bo, Li & Wang, Cong & Liu, Qian. (2021). Progresses on New Generation Laser Direct Writing Technique. *Materials Today Nano*. 16. 100142. <https://doi.org/10.1016/j.mtnano.2021.100142>.
4. I.B. Косяк, О.А. Цубін Формування радіальних оптичних структур на круговій лазерній записуючій системі Реєстрація, зберігання і обробка даних2024, Т. 26, N 1, С. 3-8. <https://doi.org/10.35681/1560-9189.2024.26.1.308326>.
5. Yang, S., Zhang, L., & Wei, Y. (2020a). Model-based image quality optimization for submicron direct laser writing. *AIP Advances*, **10** (12). <https://doi.org/10.1063/6.0000595>.

Дослідження виконані за підтримки Національного фонду досліджень України
грант2023.04/004

ABSORPTION OF THE WIDE-GAP SEMICONDUCTORS (Fe(III) MONONUCLEAR COORDINATION COMPOUNDS)

O. Kulikova¹, O. Danilescu², P. Bourosh¹, Y. Chumakov¹, M. Cocu², I. Bulhac²

¹*Moldova State University, Institute of Applied Physics, Academy str., 5, Chisinau MD2028, R. Moldova.*

²*Moldova State University, Institute of Chemistry, Academy str., 3, Chisinau MD2028, R. Moldova.*

This paper presents the study of wide-gap semiconductors in the form of two new mononuclear coordination compounds of iron(III), ($[\text{Fe}(\text{H}_2\text{L})(\text{H}_2\text{O})_2]\cdot\text{X}_3\cdot2.5\text{H}_2\text{O}$, where $\text{X} = \text{NO}_3^-$ (**1**), ClO_4^- (**2**)) based on the 2,6-diacetylpyridine bis(picolinoylhydrazone) (H_2L).

Optical absorption spectra were measured using UV-Vis Spectrophotometer (PerkinElmer Lambda 25) at 300 K in the wavelength range 200-500 nm measured.

The UV-vis spectral titration of H_2L with Fe^{3+} were carried out by gradually increasing the amount of Fe^{3+} (10-100 μL) in the ethanol media of ligand.

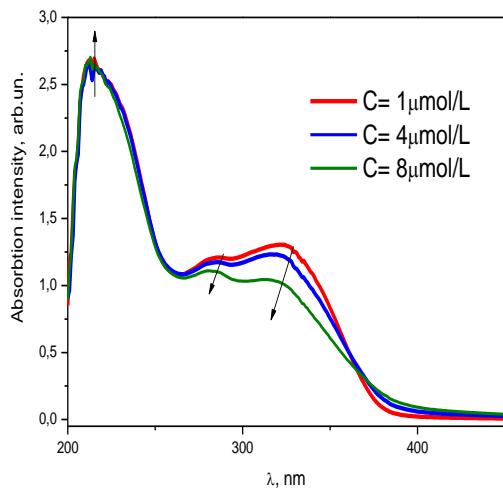


Fig.1 Absorption spectra at various concentration (C)

The absorption maximum in this region can be attributed to the intramolecular $\pi-\pi^*$ charge transfer transition.

The absorption (Ab) spectra of three concentrations of Fe^{3+} (**1**) (Fig.1) represent a series of curves characterized by the position of the absorption maxima at the same wavelength and differing only in their intensities. Successive addition of Fe^{3+} to H_2L is accompanied by the appearance of shoulder peaks in the region of 200-350 nm and one isosbestic point at 360 nm. The ratio of the intensities of the peaks forming the spectra changed with increasing Fe^{3+} concentration.

To estimate the band gap E_g , Tauc [1] coordinates were used:

$$(\alpha \cdot h\nu)^{1/n} = h\nu - E_g,$$

where α is the absorption coefficient, E_g is the band gap, n is a constant depending on the type of electronic transition in the material.

An analysis of the optical absorption spectra under the assumption of direct allowed transitions ($n=1/2$) is presented in the inset to Fig. 2a. Approximation of the intrinsic absorption edge constructed in coordinates $(\alpha h\nu)^2$ from $(h\nu)$ gives the value of the direct band gap (E_g^{dir}). Approximation of the intrinsic absorption edge plotted in coordinates $(\alpha h\nu)^{1/2}$ from $(h\nu)$, which corresponds to allowed indirect transitions, shows the value of the indirect band gap (E_g^{indir}) (Fig. 2b).

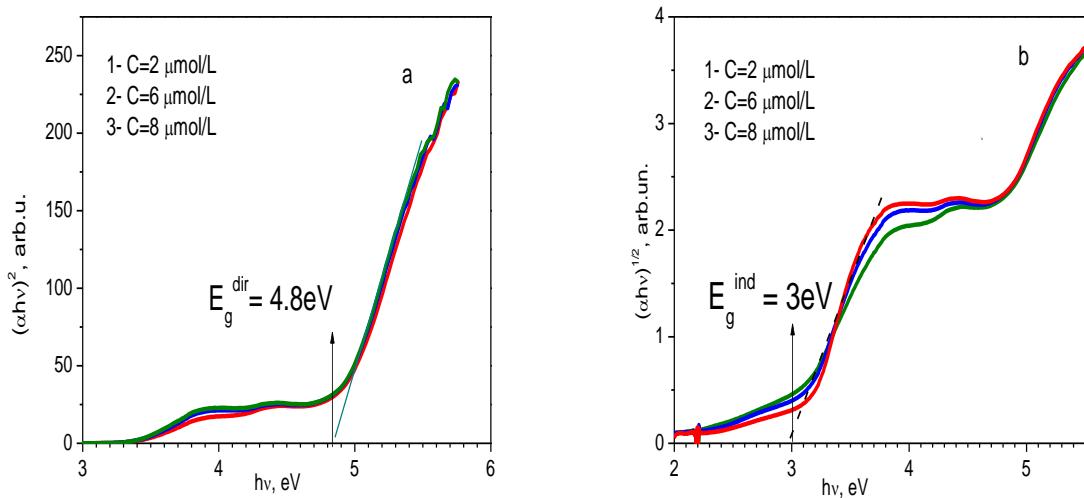


Fig.2 The edge of the optical absorption band in the Tauc coordinates of the sample for three concentrations

Approximations of the curves of the intrinsic absorption edge taken for different concentrations converge at one point and give the exact value of the width of the direct ($E_g^{\text{dir}} = 4.8 \text{ eV}$) and indirect ($E_g^{\text{indir}} = 3.0 \text{ eV}$) band gap.

These values agree well with those theoretically calculated from the band structure.

The results show that addition of Fe^{3+} leads to the formation of stable coordination compounds.

[1] Tauc J. Optical Properties and Electronic Structure of Amorphous Germanium /J.Tauc, R.Grigorovici, A.Vancu. *Physica status solidi*. 1966. Vol. 2, I. 15. P. 627–637.

Acknowledgement. The authors are grateful for the subprograms financed by the Ministry of Education and Research of R. Moldova: 011201, 011202 and 010602.

X-Ray Dynamical Diffraction of Ion-Implanted Boron Layers in Si

S.V. Lizunova, G.I. Nizkova, A.O. Bilotska, T.P. Vladimirova, Ya.V. Vasylyk, O.S. Skakunova,
I.I. Demchik, L.I. Makarenko, I.M. Zabolotny, V.V. Molodkin. V.V. Lizunov

G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the N.A.S. of Ukraine
36 Academician Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv, Ukraine

X-Ray diffraction methods are powerful instrument for investigation of structure of solids, in particular ion-implanted materials. Because of ion bombardment during the process of boron implantation in silicon, structural transformations such as the formation of a highly disordered thin surface layer, as well as the formation and accumulation of radiation defects, are possible. Using dynamical scattering pattern instead of a kinematical pattern, as well as measuring and procession of the dependences of the total integrated intensity of dynamical diffraction (TIIDD) on the diffraction conditions allows us to significantly decrease the measuring time and increase precision of diagnostics of the defect structure. The aim of this work is to clarify the possibilities of determining the parameters of the defect structure of single crystals irradiated with boron ions using the method of azimuthal dependences (AD) of TIIDD.

The studied Si sample is irradiated with boron ions at a dose of 10^{12} atoms/cm² with energy of 400 keV. The experimental and calculated AD TIIDD are shown in Fig. 1.

The studied crystal is divided into three zones: (1) a non-diffracting absorbing ‘amorphous’ layer with a thickness of t_{am} (disordered surface layer—DSL), (2) a stressed zone with a thickness of $t_{\text{k.s.l.}}$ without mechanical distortions and elastic deformations, (3) a dynamically scattering single crystal containing randomly distributed defects (RDD). The markers are experimentally measured AD TIIDD, the markers “■” are AD TIIDD for the initial Si single crystal, the markers “●” are AD TIIDD for a Si single crystal irradiated with B ions, solid line is AD TIIDD, calculated taking into account the influence of DSL and RDD (curve 1 + curve 2), the dashed line is AD TIIDD, calculated taking into account the influence of only the amorphous absorbing sub-layer of DSL, the dashed-dotted line is AD TIIDD, calculated taking into account the influence of only DSL, the dotted line is AD TIIDD, calculated taking into account the influence of only RDD.

A comparison of the experimental AD TIIDD for the initial and the irradiated samples shows a significant difference between AD TIIDD of the irradiated single crystal measured for different reflections. This effect is due to the predominant effects of different types of defects under different diffraction conditions on TIIDD. Namely, reflection (220) is selectively sensitive to the amorphous absorbing layer parameters, reflection (115) is

selectively sensitive to the kinematically scattering layer parameters, and reflection (224) is selectively sensitive to RDD of the dynamically scattering volume.

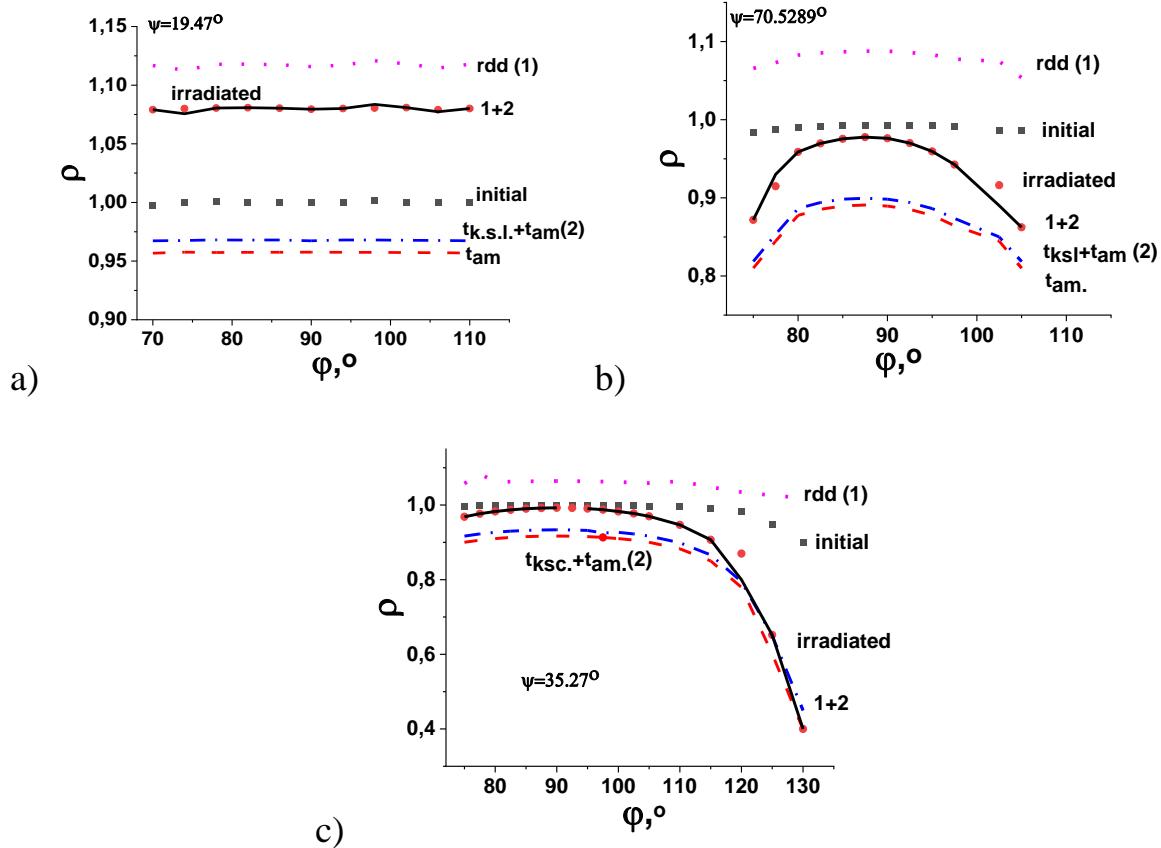


Fig.1. Azimuthal dependences of the TIIDD normalized to the integrated intensity of dynamical diffraction of a perfect crystal: reflex (224) (a), reflex (115) (b), reflex (220) (c). ψ is the angle between the reflecting planes and the crystal surface.

By processing of the experimental data for three about-mentioned reflections of the ion-irradiated sample, the values of the defect structure parameters have been obtained. The values of the thicknesses of the absorbing and kinematically scattering DSL and the concentration of small randomly distributed dislocation loops have been obtained. The optimal conditions of Bragg asymmetric diffraction for diagnostics of defects in boron-implanted silicon single crystal are found.

Characterization of the structure of melanin grown by the self-organization method using infrared spectroscopy

R.O. Lysenko¹, O.V. Pylypova¹, M.O. Semenenko²

¹*Educational and Scientific Institute of High Technologies, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Volodymyrska Street, 64, Kyiv 01601, Ukraine*

²*V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 41 Pr. Nauky, Kyiv 03028, Ukraine.*

Melanin is a natural, biocompatible and biodegradable material with unique properties such as broadband UV light absorption, mixed electronic-ionic conductivity and electrical conductivity dependent on the hydration state. These characteristics make this material perspective for use in photovoltaic (PV) converters.

The goal of this work is to characterize the structure of melanin and provide the base for further research on its usage in the field of electronics. One of the most important methods for the identification and characterization of organic compounds is Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR). FTIR spectroscopy is appropriate to use in a study of grown melanin films to identify specific chemical bonds in the film structure, especially OH groups affecting the conductivity [1]. Infrared (IR) absorbance spectra were measured at room temperature using a PerkinElmer Spectrum BXII FTIR spectrometer. The measurements were carried out in the spectral range of 4000 to 500 cm^{-1} with the resolution of 4 cm^{-1} and measurement accuracy of 0.5 %. A clean glass substrate (without a melanin film) was used as a reference sample.

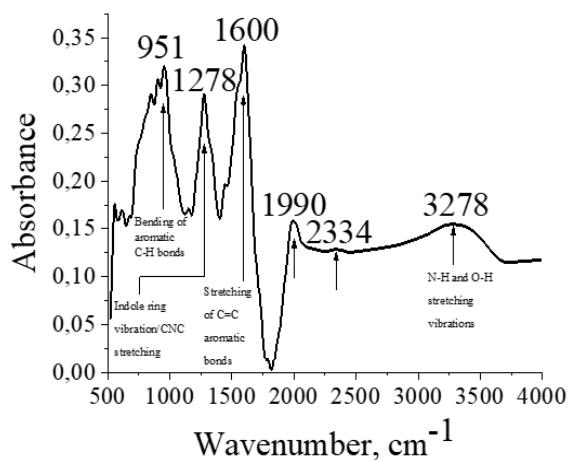


Fig. 1 FTIR absorbance spectrum of melanin.

Fig. 1 shows the characteristic bands in the ranges of 3600-2500 cm^{-1} and 1700-1200 cm^{-1} , which include the characteristic peaks at 3278 cm^{-1} , 1600 cm^{-1} , and 1278 cm^{-1} , respectively. A narrow band near the peak at 951 cm^{-1} can also be distinguished. A broad absorbance band in the range of 3600-2500 cm^{-1} is characterized by stretching vibrations of N-H and O-H bonds of carboxylic acid, as well as phenolic and aromatic amino functions present in

indole and pyrrole systems. This band also includes vibrations of sp^2 and sp^3 hybridized CH_n bonds. The characteristic absorbance band in the range of $1700\text{-}1200\text{ cm}^{-1}$ is determined by two main peaks present in it. The peak at 1600 cm^{-1} is characterized by the stretching vibrations of the aromatic ring, which consists of C=C bonds. The peak at 1278 cm^{-1} is determined by the bending vibrations of N-H bonds and stretching vibrations of C-N bonds (secondary amine) of the indole system. The band near the peak at 951 cm^{-1} refers to the bending vibrations of aromatic C-H bonds located both in the plane of the ring and perpendicular to it.

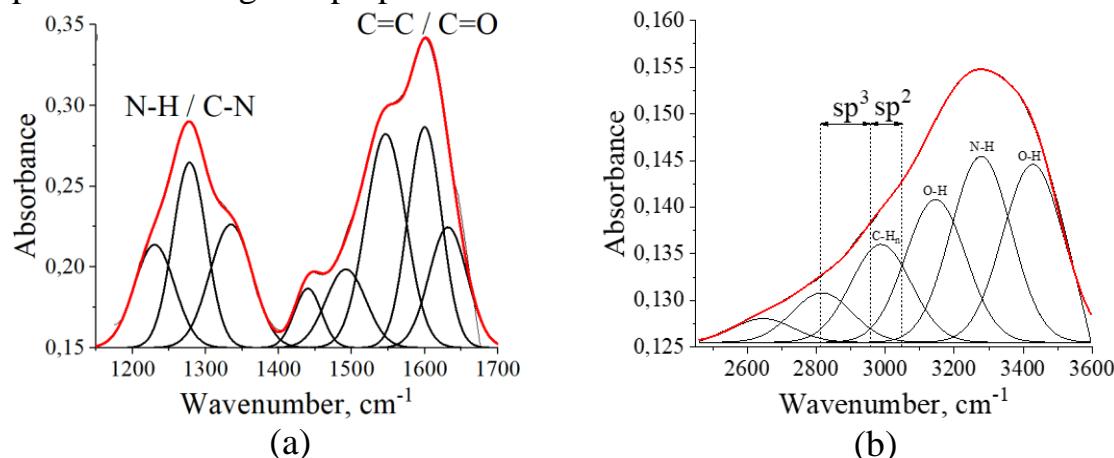


Fig. 2 Gauss deconvolution of the (a) $1700\text{-}1200\text{ cm}^{-1}$ and (b) $3600\text{-}2500\text{ cm}^{-1}$ bands of the FTIR absorption spectrum of melanin.

For a more detailed explanation of the origin of the peaks, the IR absorbance spectra of melanin in the ranges of $1700\text{-}1200\text{ cm}^{-1}$ (Fig. 2a) and $3600\text{-}2500\text{ cm}^{-1}$ were deconvolved (Fig. 2b). In the range of $1700\text{-}1200\text{ cm}^{-1}$ it was found that the characteristic peaks are located at 1632 cm^{-1} , 1600 cm^{-1} , 1541 cm^{-1} , 1485 cm^{-1} , 1440 cm^{-1} , 1337 cm^{-1} , 1278 cm^{-1} , and 1230 cm^{-1} . Five peaks in the range of $1632\text{-}1440\text{ cm}^{-1}$ characterize the stretching vibrations of the C=C bonds that form the aromatic ring and the C=O bonds of the carboxyl group. The peaks at 1337 cm^{-1} , 1278 cm^{-1} , and 1230 cm^{-1} describe the bending vibrations of N-H bonds and the stretching vibrations of C-N bonds (secondary amine) of the indole system. Gauss deconvolution in the range of $3600\text{-}2500\text{ cm}^{-1}$ shows that the characteristic peaks are located at 3428 cm^{-1} , 3278 cm^{-1} , 3146 cm^{-1} , 2987 cm^{-1} , 2816 cm^{-1} , and 2645 cm^{-1} . The main absorbance bands of melanin are observed at 3428 cm^{-1} and 3146 cm^{-1} (stretching vibrations of O-H bonds) and 3278 cm^{-1} (stretching vibrations of N-H bonds). The bands at 2987 cm^{-1} , 2816 cm^{-1} , and 2645 cm^{-1} are associated with the stretching vibrations of hybridized C-H_n bonds.

- Pralea, I.-E.; Moldovan, R.-C.; Petrache, A.-M.; Ilieş, M.; Hegheş, S.-C.; Ielciu, I.; Nicoară, R.; Moldovan, M.; Ene, M.; Radu, M.; et al. From Extraction to Advanced Analytical Methods: The Challenges of Melanin Analysis. *Int. J. Mol. Sci.* 2019, 20, 3943. <https://doi.org/10.3390/ijms20163943>

Practical Aspects of Single-, Multi-Pulse, and Continuous Wave Laser Micro-/Nano-Structuring of Materials

P. Lytvyn, A. Korchovyii, A. Rusavsky, A. Vasin, K. Svezhentsova, V. Dzhagan

V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, prospect Nauky, 41, Kyiv-03028, Ukraine.

Laser micro- and nano-structuring represents a transformative approach in advanced manufacturing, offering exceptional precision and adaptability for material processing. Its relevance spans a broad range of industries, with prominence in the semiconductor sector, where laser technologies enable the fabrication of intricate device architectures essential for next-generation electronic systems. Laser-based processing supports key operations such as photolithography, annealing, and direct-write circuit patterning, thus driving innovation in high-performance, miniaturized semiconductor components for modern computing and communication technologies.

The interaction between laser radiation and materials is fundamentally governed by their optical properties and electronic structure. In metal films, laser energy is primarily absorbed by free electrons through inverse bremsstrahlung, leading to rapid electron gas heating. This interaction is effectively described by the two-temperature model, wherein the electron and lattice subsystems evolve separately before reaching thermal equilibrium, thereby influencing the ablation dynamics and surface structuring. In semiconductors, incident photons with energies exceeding the bandgap can excite electrons from the valence to the conduction band, potentially inducing ultrafast melting or phase transformations. These processes are critically dependent on the material's band structure and thermal conductivity, parameters that are vital for accurately predicting and controlling the structuring outcomes.

This study investigates the practical application of three laser processing modalities—single-pulse, multi-pulse, and continuous wave (CW)—for the micro- and nano-structuring of metal films and semiconductor materials. Single-pulse irradiation involving nanosecond pulses, enables high-resolution structuring by minimizing heat-affected zones, making it ideal for precision ablation with well-defined boundaries. The ablation threshold, determined experimentally, defines the onset of material removal; it is measured at a high-resolution using an atomic force microscopy. Phase transformation control is achieved through complementary methods including micro-Raman spectroscopy and grazing incidence X-ray diffraction. Multi-pulse irradiation exploits incubation effects, wherein repeated pulses reduce the effective ablation threshold, enhancing process efficiency for applications such as micro-drilling or patterning. In contrast, CW lasers provide sustained energy

input, facilitating thermal modifications like annealing or melting without material removal.

The laser systems utilized in this work include a 1064 nm infrared fiber laser operating in a pulsed regime (120 ns pulse duration, 0.75 mJ pulse energy) and a 455 nm, 10 W CW semiconductor laser. The 1064 nm pulsed laser induces significant thermal effects, which, enable efficient ablation of metals and semiconductors. The 455 nm CW laser, due to its shorter wavelength, offers improved absorption in semiconductors, thereby enhancing thermal energy coupling—especially valuable for annealing processes aimed at modifying dopant profiles or crystallinity. Environmental parameters such as preheating of the sample and the control of ambient atmosphere were also systematically adjusted to optimize the structuring process.

Representative applications demonstrated in this work include maskless rapid prototyping of thin-film metal/semiconductor structures, laser-assisted processing of two-dimensional materials for sensor platforms, micro-polishing, semiconductor annealing, and surface nano-structuring.

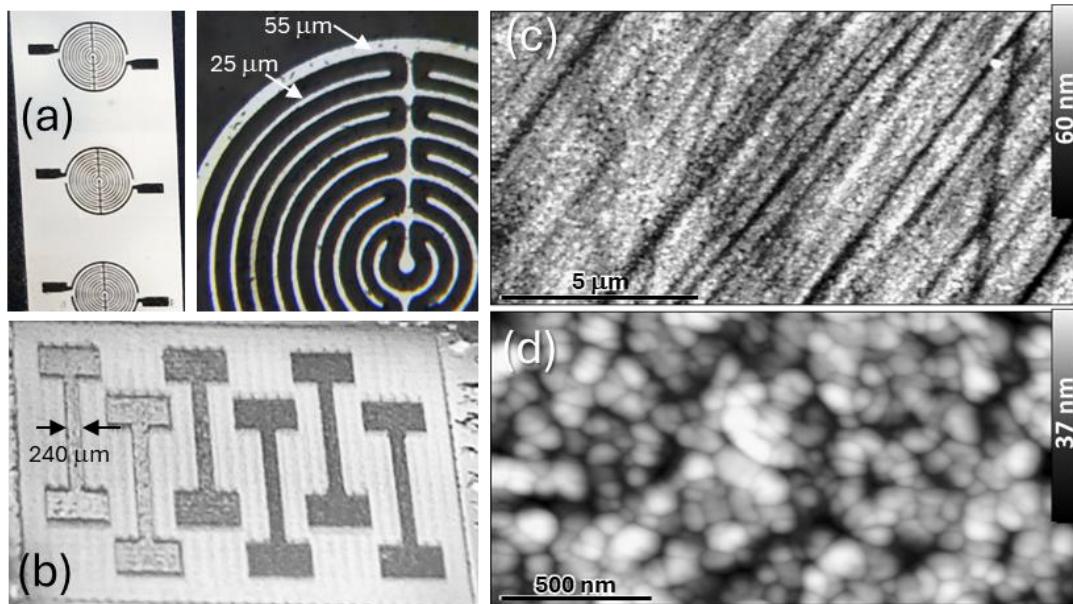


Fig.1. IR laser engraved Al on glass pressure sensor structure (a), CW laser produced graphene oxide-based sensor test structure (b), AFM images of the CW laser annealed VO_x thin film (c,d).

A comprehensive understanding of laser–material interactions is essential for advancing micro- and nano-structuring technologies. By tailoring laser parameters and employing state-of-the-art characterization techniques, this study aims to enhance material processing strategies, particularly within the semiconductor domain, thereby enabling novel device architectures and facilitating technological innovation.

This study was supported by NRFU project #2023.05/0022

Вплив органічного розчинника на хіміко-механічне полірування монокристалів індій стибіду травильними сумішами $I_2 + HI$

Маланич Г.П., Томашик В.М.

*Інститут фізики напівпровідників ім. В.С. Лашкарьова НАН України,
пр. Науки 41, м. Київ, Україна, 03028, e-mail: galya.malanich@gmail.com*

Метою роботи є розробка нових ефективних поліруючих травників ($I_2 + HI$) / етиленгліколь (ЕГ) з широким інтервалом швидкостей травлення InSb, а також високою якістю полірованої поверхні монокристалів після поетапної обробки, яка включає струнну різку зливків на пластиини, механічне шліфування та хіміко-механічне полірування (ХМП).

Експериментальні дослідження проводили на монокристалічних пластинах InSb (112) *n*-типу провідності розміром 5 мм × 5 мм × 1,5 мм. Порушеній шар, який утворюється на поверхні пластин в процесі різки, частково видаляли за допомогою механічного шліфування зразків водними суспензіями алмазних абразивних порошків ACM 10/7, ACM 5/3 та ACM 1/0. Для повного видалення порушеного після різки та шліфування шару товщиною ~30 мкм використовували ХМП універсальним бромвиділяючим травником, розробленим в нашій лабораторії, зі швидкістю полірування $v \approx 30$ мкм/хв. Процес ХМП проводили на скляному полірувальнику, обтягнутому батистовою тканиною, з неперервною подачею травника зі швидкістю 2-3 мл/хв впродовж 2 хв і тиску на пластиини 2-3 кПа. Швидкість травлення визначали за зменшенням товщини пластин до та після травлення за допомогою електронного індикатора TESA DIGICO 505 MI з точністю ± 0,2 мкм. Для приготування травильних розчинів використовували кристалічний I_2 , 45 %-ну HI та ЕГ (склад виражали у мас. %).

Пластиини InSb після процесу ХМП промивали за схемою (по 1 хв. в кожному розчині): $Na_2S_2O_3$ (1.4 М) → H_2O (дист.) → 15% $NaOH$ → H_2O (дист.) → H_2O (дист.)

Мікроструктуру поверхні зразків після механічної та хімічної обробки досліджували за допомогою металографічного мікроскопа MIM-7 з цифровою відеокамерою eTREK DCM800 (8 Mpix). Шорсткість полірованих поверхонь вимірювали з використанням скануючого зондового мікроскопу NanoScope Ша Dimension 3000TM (Digital Instruments, США). Хімічний склад поверхні визначали методом енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (EDS/EDX) на приладі ZEISS EVO 50XVP (Carl Zeiss, Німеччина), оснащенному енергодисперсійним рентгенівським спектрометром INCA PentaFETx3 для елементного аналізу з точністю ~0,1%.

ХМП травильними розчинами ($I_2 + HI$) / ЕГ. Використовуючи процес хіміко-динамічного полірування (ХДП) на монокристалічних пластинах не завжди можна отримати високоякісну поліровану поверхню з ідеальною площинністю в макромасштабі, тому для таких цілей краще використовувати метод ХМП. Відомо, що за рахунок механічної складової швидкість видалення шару напівпровідникового матеріалу з поверхні пластин методом ХМП може бути в декілька разів вищою, ніж при використанні травника того ж складу для ХДП. Так, поліруючий травник складу $I_2 + HI$ (базовий розчин – **БР**) для InSb характеризується швидкістю ХДП $\approx 25 \text{ мкм/хв}$, тоді як швидкість ХМП в цьому травнику складає $\sim 200 \text{ мкм/хв}$.

Для зменшення швидкості ХМП (зменшення вмісту активного компоненту) та покращення якості оброблюваної поверхні безпосередньо перед проведенням процесу ХМП до базового травника БР додатково додавали певну кількість модифікатора в'язкості ЕГ. Як видно з рис. 1, з розведенням базового травника швидкість ХМП змінюється в межах 120,0-7,0 мкм/хв. Поверхня напівпровідникових матеріалів після ХМП при розведенні БР від 60 до 5 об.% формувалась полірованою та високої якості.

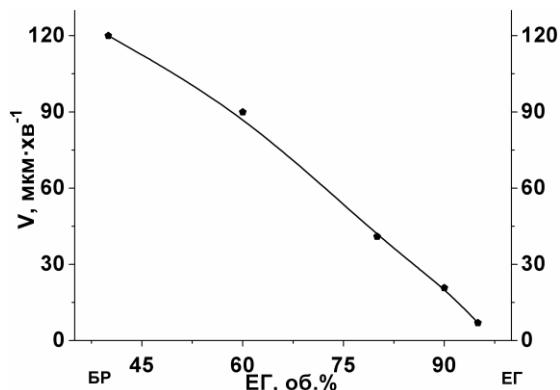


Рис. 1. Залежність швидкості ХМП (мкм/хв.) InSb від розведення базового поліруючого травника БР етиленгліколем.

Дослідження поверхні InSb після ХМП розробленим травником ($I_2 + HI$) / ЕГ методом ACM показали, що на поверхні досліджених кристалів формується мікрорельєф з параметром $R_a < 1 \text{ нм}$.

За допомогою методу EDS/EDX досліджували поверхню зразків після ХМП обробки та контролювали концентрації основних елементів (In та Sb). Кисень і вуглець не були виявлені на полірованій поверхні InSb. Відсутність I та S на поверхні зразків свідчить про те, що розроблено адекватну процедуру промивання зразків.

Робота виконана за рахунок бюджетного фінансування проєкту № 0121U108511 Національної академії наук України. Автори щиро вдячні всім захисникам України та рятівникам, завдяки яким стало можливим проведення досліджень та публікація їх результатів.

Structural and microwave properties of hybrid carbon–iron filled polymer thin-film composites

Maziar D.M., Kolomys O.F., Nikolenko A.S., Strelchuk V.V., Alieksandrov M.A., Popenko V.I., Tsybrii Z.F., Melezhyk Ye.O., Lytvyn P.M., Gudymenko O.Yo.

V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, prospect Nauky, 41, Kyiv-03028, Ukraine.

Hybrid organic–inorganic carbon–metal filled polymer thin-film composites are promising for advanced applications of microwave absorption materials with broadband absorption, greater absorption values, simple functionality, low density and reduced thickness [1–2]. Understanding the processing parameters of such microwave absorbers primarily involves the synergistic combination of the electrical conductivity of graphitic sp^2 carbon with the magnetic properties of various absorbing centers, such as ferrites, carbonyl iron, and carbon black, within polymeric matrices including silicone rubber, phenolic, and epoxy resins.

The objective of this study is to enhance EMI (electromagnetic interference) shielding and microwave absorption efficiency by precisely controlling and evaluating the performance of microwave absorbers based on magnetic absorbing centers, with varying concentrations and dispersion of sp^2 carbon and carbonyl iron particles. The electrical conductivity and dielectric properties of the composites are characterized and can be tailored to optimize EMI shielding and microwave absorption performance across a broad frequency range, critical for a wide array of advanced electronic applications.

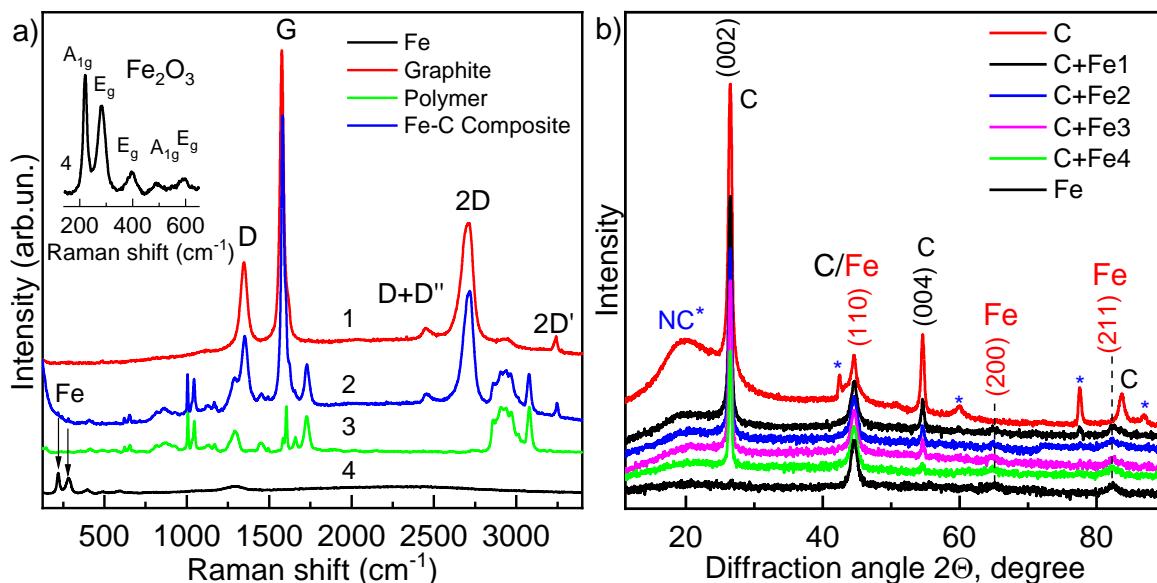


Fig. 1 a) – Raman spectra of individual components (1,3,4) and result spectrum (2) of carbon–iron composite; (b) – XRD patterns of the carbon–iron-polymer thin-film composites with different concentrations of Iron particles. The inset in (a) shows the Raman spectrum of Iron (Fe_2O_3) particles.

In this study, conductive carbon–iron filled paints were prepared by dispersing graphitic and carbonyl iron particles in a polymer solution using a

simple blending technique followed by ultrasonication. The resulting paints were coated onto substrates and characterized using a suite of advanced experimental techniques. The structural, electrical, and microwave absorption and shielding properties of the hybrid composites were investigated depending on their composition and processing conditions using micro-Raman spectroscopy, X-ray diffraction, scanning electron microscopy, scanning probe microscopy, energy-dispersive X-ray spectroscopy, and microwave and electrical characterization methods. Special attention was devoted to studying the spatial distribution of carbon and iron particles within the composite, their interaction with the polymer matrix, and the mechanisms governing electronic transport and microwave absorption in the hybrid conductive system (fig. 1). The results revealed an almost uniform spatial distribution of carbon and iron particles throughout the polymer matrix and resistive behavior of microwave absorption.

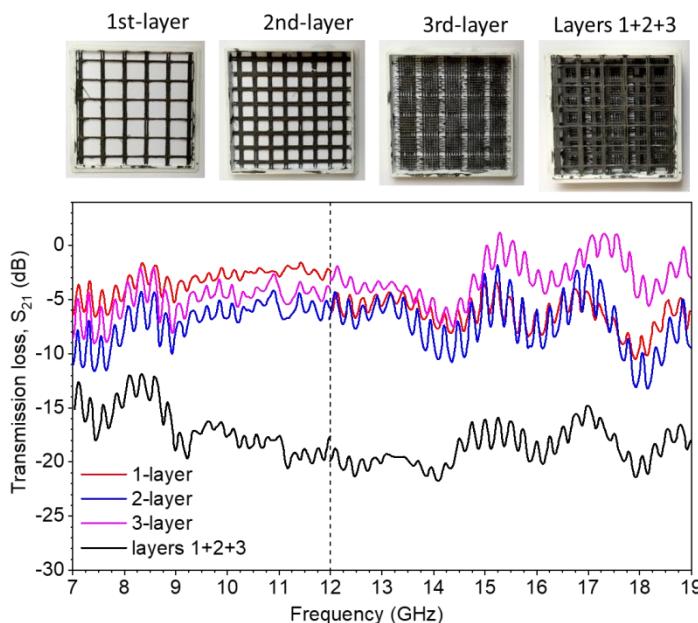


Fig. 2 Appearance of the resistive layers based on plastic meshes coated with a conductive carbon-iron filled polymer composite, and the experimental frequency dependence of transmission loss.

polymer composites and their relationship with the morphological, structural, and electronic features of the system. These findings provide a foundation for their future integration into advanced functional applications. This study was supported by NRFU project #2023.04/0026.

In the form of a microwave absorbing resistive screen painted onto a plastic meshes, the investigated carbon–iron composites demonstrated transmission losses of up to –20 dB over a broad frequency range 7 - 19 GHz (fig. 2). These losses can be widely tuned depending on the carbon and iron content in the composite.

The obtained results are essential for understanding the development of the electrical and microwave absorption properties of hybrid carbon–iron filled

1. F. Ruiz-Perez, S.M. López-Estrada, R.V. Tolentino-Hernández, F. Caballero-Briones, Carbon-based radar absorbing materials: A critical review, *J. Sci. Adv. Mater. Devices* 7 (2022) 100454.
2. S. Kim, S. Lee, Y. Zhang, S. Park, J. Gu, Carbon-Based Radar Absorbing Materials toward Stealth Technologies, *Adv. Sci.* 10 (2023).

Особливості спектрів ІЧ відбивання кераміки на основі ZrO_2 з різною кристалічною структурою

Мельничук О.В.¹ Корсунська Н.О.², Мельничук Л.Ю.¹, Хоменкова Л.Ю.²

¹ Ніжинський державний університет імені Миколи Гоголя 16608, м. Ніжин, вул. Графська, 2. E-mail: mov310310@gmail.com

² Інститут фізики напівпровідників імені В.С. Лашкарьова НАН України 03028, Київ 28, проспект Науки, 45. E-mail: larysa.khomenkova@gmail.com

Один із оксидів металів, до яких прикута увага дослідників, є оксид цирконію ZrO_2 . Його унікальні властивості, а саме: хімічна, механічна та термічна стабільність; висока йонна провідність; висока діелектрична стала; висока розчинність домішок – зумовлюють його широке застосування. Зокрема, нанопорошки, тонкі плівки та кераміка оксиду цирконію, легованого різними типами домішок, є перспективними матеріалами сучасної мікроелектроніки та сенсорики, альтернативної енергетики тощо.

Авторами досліджувалася нелегована кераміка ZrO_2 , а також легована Sc і Ce ($ZrO_2(10Sc,1Ce)$), ітрієм $ZrO_2(Y)$ або європієм $ZrO_2(Eu)$. Кераміка $ZrO_2(10Sc,1Ce)$ була одержана спіканням комерційних порошків фірми DKKK (Японія), кераміка $ZrO_2(8Y)$ з порошків фірми Tosoh (Японія), а кераміка $ZrO_2(Y)$ та $ZrO_2(Eu)$ з різним вмістом ітрію та європію – спіканням відповідних оксидів.

Порошки пресувалися під тиском $P = 20 \div 100$ МПа та відпалювалися за температур $1100 \div 1600$ °С. Спектри ІЧ-відбивання нелегованої та легованої кераміки ZrO_2 реєструвалися за допомогою спектрометра Shimadzu IRTtracer-100 за кута падіння збуджуючого світла 13° .

Для аналізу спектрів зовнішнього ІЧ-відбивання авторами розроблено програми, що дозволяють їх моделювати та здійснювати дисперсійний аналіз. Методом дисперсійного аналізу експериментальних спектрів ІЧ-відбивання за допомогою співвідношень Крамерса–Кроніга визначено частоти оптичних фононів, статичну та високочастотну діелектричну проникність кераміки ZrO_2 вказаних фаз. Показано, що кераміка ZrO_2 добре моделюється за використання взаємно узгоджених параметрів, отриманих раніше для монокристалів ZrO_2 .

На основі розробленої математичної моделі за врахування вкладу фононів у діелектричну функцію розраховано спектри зовнішнього ІЧ-відбивання та тривимірну поверхню в області «залишкових променів» для ZrO_2 . На основі розроблених програм змодельовані експериментальні спектри і одержано добре узгодження теорії з експериментом.

Показано, що легування європієм з вмістом 1÷5 мол. % не змінює моноклінну кристалічну структуру, притаманну нелегованому оксиду цирконію. В той же час підвищення вмісту європію до 10 мол. % дозволяє стабілізувати кубічну фазу, яка є важливою для реалізації іонної провідності.

Показано також, що кераміка $ZrO_2(10Sc,1Ce)$ має кубічну структуру. Для зразків кераміки оксиду цирконію $ZrO_2(8Y)$ фірми Tosoh (Японія), що виготовлені з порошків, одержаних сумісним осадженням, виявлено, що вони мають також кубічну структуру. При цьому у кераміці, отриманій методом твердофазної реакції оксидів ZrO_2 та Y_2O_3 за температур 1100 °C та 1250 °C, було зареєстровано утворення фази тетрагонального твердого розчину $Y-ZrO_2$.

Як приклад, на рис. 1 наведено розраховану поверхню ІЧ-відбивання та експериментальний спектр для зразка $ZrO_2(Sc,Ce)$. Розрахунок поверхні відбивання проведено скануванням за частотою та коефіцієнтом затухання фононної підсистеми при кроці сканування відповідно $\Delta\nu = 1 \text{ см}^{-1}$ та $0,01\gamma_f$. За відсутності взаємодії випромінювання з керамічною поверхнею ZrO_2 $R(\nu, \gamma_f) = 1$ і в даній області поверхня плоска. За наявності збудження коливань фононної підсистеми на поверхні $R(\nu, \gamma_f)$ проявляються «ущелини».

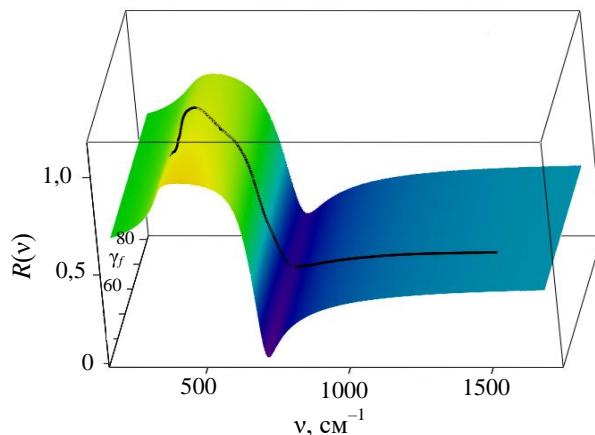


Рис. 1. Поверхня ІЧ-відбивання ZrO_2 (кубічна модифікація) за орієнтації $E \perp c$. Точки – експеримент для зразка $ZrO_2(Sc,Ce)$ кубічної модифікації

Встановлено, що глибина «ущелин» залежить від параметрів системи: частоти ІЧ-випромінювання, коефіцієнта затухання поперечного оптичного фонона тощо. Однак зміна частот фононів та високочастотної і статичної діелектричних проникностей призводить до значної деформації спектра $R(\nu, \gamma_f)$ в області «залишкових променів» кераміки ZrO_2 . Достовірність отриманих результатів підтверджується методами КРС.

Провідність оксиду галію із зменшенням вмісту кисню

Пришляк О.С., Балабай Р.М.

Криворізький державний педагогічний університет,

пр. Університетський, 54, 50086, Кривий Ріг, Україна

Реалізація пристройів атомарного масштабу уможливлює інтеграцію функцій високої щільності та високої продуктивності. Але при цьому, дефекти решітки в кристалічних матеріалах на атомарному масштабі приводять до появи нетривіальних властивостей. Зокрема, кисневі дефекти кристалічної решітки в оксидах змінюють електричні, оптичні, магнітні та хімічні властивості матеріалів, значно впливаючи на функції та властивості пристройів на основі оксидів [1]. Кисневі вакансії є фундаментальними дефектами в оксидах, іноді бажаними для забезпечення певної функціональності, а іноді небажаними, коли метою є досконалість кристала. Особливий виклик тут полягає в тому, що концентрація, при якій дефекти стають «невидимими», може серйозно вплинути на властивості оксидів. У таких випадках співвідношення «дефект-структура-властивість» можуть розглядатися лише опосередковано і часто руйнівним чином, що впливає на сам стан зразка. При великих концентраціях доступні різні методи, що роблять «видимими» кисневі вакансії, але залишається значний розрив між відповідною концентрацією дефектів, що доступні експериментальним методам, та спостережуваними явищами в області низьких концентрацій вакансій ($\leq 10^{20} \text{ см}^{-3}$). Отже, існує величезний попит на засоби, які дозволяють досліджувати низькі концентрації кисневих вакансій з більшою просторовою точністю. Одним із підходів, що додається до найсучасніших методів хімічних залежностей, методів фотоеемісійної спектроскопії або трансмісійної електронної мікроскопії тощо - є теоретичні дослідження із перших принципів.

Як новий представник напівпровідникових матеріалів оксид галію (Ga_2O_3) привернув значну увагу через свою ультра-широку заборонену зону, приблизно 4.5-5.0 eВ, високий внутрішній опір та чутливість до концентрації кисневих вакансій [2]. Ці властивості роблять Ga_2O_3 відмінним кандидатом для мемристорів, окрім використання у силових пристроях. Кисневі вакансії у плівках Ga_2O_3 є ключовими у досягненні стабільного резистивного перемикання. Для резистивних пам'ятей з довільним доступом, заснованих на Ga_2O_3 ці вакансії зазвичай формуються при умові недостатку кисню під час осадження. Проте насьогодні, інформація щодо встановлення відповідності між рівнями концентрацій вакансій в оксидах металів та пов'язаних з ними явищами, що виникають через вакансії кисню, обмежена.

На атомарному рівні нами було започатковано аналіз провідності плівок β -оксиду галію при зміні вмісту кисню в них. Моноклінні гратці $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ із просторовою групою $C2/m$ відповідають три нееквівалентно позиційовані атоми кисню: трикоординовані $\text{O}1$ та $\text{O}3$, чотирикратно координований $\text{O}2$ (рис.1).

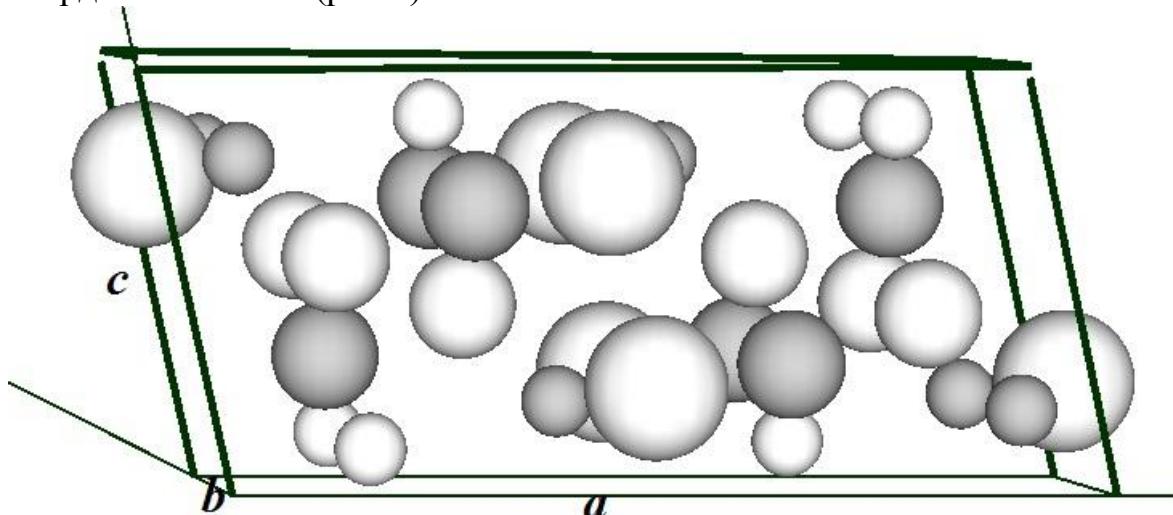


Рис.1. Одинична комірка $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ з умовними позначеннями різно координованих атомів кисню: трикоординований $\text{O}1$ – маленька біла сфера, чотирикратно координований $\text{O}2$ – біла сфера середніх розмірів та $\text{O}3$ – велика біла сфера

В обчислювальних експериментах нашого дослідження використано методи теорії функціонала електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів. Використано суперрешітковий підхід при моделюванні плівок. Щодо виявлення змін в електронних характеристиках нанооб'єктів, зумовлених видаленням атомів кисню, розроблялись атомні модельні об'єкти, що відтворювали кристалографічний простір нескінченної плівки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ товщиною 0,304 нм моноклінної сингонії з поверхнею типу (010) та обмеженого кластера розміром порядку 1,6 нм та мали різні концентрації вакансій кисню – від 6,67 % до 1,67%.

Отримані розподіли просторової густини валентних електронів та їх перерізів усередині нанооб'єктів, розподіли густини електронних станів та електричні заряди в околі вакансії кисню.

1. Gunkel F., Christensen D.V., Chen Y. Z., and Pryds N. (2020). Oxygen vacancies: The (in)visible friend of oxide Electronics. *Appl. Phys. Lett.*, 116, 120505. <https://doi.org/10.1063/1.5143309>

2. Yimin Liao, Zhigao Xie, Hanzhao Song, Jierui Xue, and Chee-Keong Tan (2024). Engineering oxygen vacancy-induced interface trap memristive effect in selenium-implanted gallium oxide. *Appl. Phys. Lett.*, 125, 192106. <https://doi.org/10.1063/5.0233137>

3. Balabai R., Bondarenko O., Naumenko M. (2022) Energy levels of acceptor impurities in $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ nanostructures. *Materialstoday: Proceedings*. 62(9), 5838. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.05.365>

Вплив нанокластерних утворень на спектри ЯКР I^{127} змішаних шаруватих напівпровідників на основі йодидів свинцю і кадмію.

Вертегел І. Г., Чесноков Є.Д., Овчаренко О. І., Бондар О.В., Буківський А.П., Гнатенко Ю. П.

Інститут фізики НАН України, м. Київ, пр..Науки, 46.

Шаруваті сполуки $Pb_{1-x}Cd_xI_2$ та $Cd_{1-x}Mn_xI_2$ є новими наноструктурованими напівпровідниками, які є перспективними високочутливими неохолоджуваними матеріалами для детекторів рентгенівського та γ -випромінювання. Фізичні властивості цих матеріалів за низьких температур і кімнатної температури пов'язані з природним утворенням нанокластерів PbI_2 та MnI_2 різних розмірів у матриці CdI_2 під час зростання кристалів. Метою роботи було на підставі аналізу спектрів ЯКР (ядерний квадрупольний резонанс) дослідити особливості структури та розподілу цих нанокластерних утворень у досліджуваних сполуках. У цьому повідомленні наводяться результати дослідження параметрів спектрів ЯКР I^{127} змішаних шаруватих напівпровідників $Pb_{0,98}Cd_{0,02}J_2(2H$ і $4H$ політипи) та $Cd_{0,98}Mn_{0,02}I_2(4H)$. Результати вимірювань спектрів ЯКР наведені в таблиці.

Кристал	$\Delta\nu$ ширина лінії ЯКР, МГц	Частота ν ($\pm 3/2$ $\leftrightarrow \pm 5/2$) МГц	Частота ν ($\pm 1/2$ $\leftrightarrow \pm 3/2$) МГц	e^2Qq_{zz} МГц	Параметр асиметрії $\eta(\%)$
$PbI_2(2H)$	0,190	8,9375	4,465	29,778	0
$Pb_{0,98}Cd_{0,02}J_2(2H)$	0,350	9,180	4,700	30,708	1,4
$PbI_2(4H)$	0,184	9,8	4,90	32,668	0
	0,200	10,3	5,15	34,334	0
$Pb_{0,98}Cd_{0,02}I_2$ 4Нполітип	0,480	10,1	5,08	*	*
	0,470	10,7	5,32	*	*
$CdI_2(4H)$	0,45	29,470	14,750	98,270	2,8
$Cd_{0,98}Mn_{0,02}I_2(4H)$	1,9	29,240	14,200	96,53	1,0

*дослідження впливу іонів на ці параметри ЯКР не проводилось

Як видно з таблиці, зі збільшенням вмісту домішок у кристалі PbJ_2 і CdJ_2 ширина лінії ЯКР ($\pm 3/2 \leftrightarrow \pm 5/2$) значно збільшується. У той же час константа квадрупольної взаємодії e^2Qq_{zz} не зазнає значних змін. Так, для кристалу $Pb_{0,98}Cd_{0,02}J_2$ (2Н і 4Н політипи) зміна e^2Qq_{zz} порівняно з чистим PbJ_2 становить не більше 3% та 2% відповідно. Крім цього, враховуючи шарувату структуру PbJ_2 і CdJ_2 можна припустити, що головні осі q_{xx} і q_{yy} градієнта електричного поля на ядрі I^{127} знаходяться в плоскому шарі і їх значення не залежать від орієнтації в площині цього шару. Це дозволяє зробити висновок, що в цих кристалах впровадження атомів Cd і Mn в матрицю PbJ_2 і CdJ_2 призводить до порушення внутрішньошарової анізотропії за рахунок того, що іонні радіуси Pb^{2+} , Cd^{2+} та Mn^{2+} дещо відрізняються (($1,25\text{\AA}$, $0,99\text{\AA}$ і $0,91\text{\AA}$). Зміна параметра асиметрії η тензора градієнта електричного поля на ядрах I^{127} $\eta = (q_{xx} - q_{yy}) / q_{zz}$ при зміні вмісту домішок в першу чергу вказує на деякий перерозподіл хімічних зв'язків в межах структурного шару. Оскільки ці зміни теж не суттєві, це вказує на те, що нанокластерні утворення в цих з'єднаннях локалізуються переважно в межах структурних шарів і не зачіпають міжшаровий простір. Отримані результати вказують на те, що іони Cd^{2+} и Mn^{2+} переважно заміщають іони Pb^{2+} в кристалічних шарах, що приводить до зміни ширини лінії ЯКР I^{127} і несуттєво змінює компоненти тензора градієнта електричного поля q_{xx} , q_{yy} і q_{zz} на ядрах I^{127} .

У досліджуваних кристалах домішкові іони утворюють локальні центри, пов'язані із заміщенням ними іонів у межах кристалічного шару, де діють сильні іонно-ковалентні зв'язки[1]. Структура PbJ_2 та CdJ_2 являє собою набір шарів J-Pb-J₂ та J-Cd-J₂, з'єднаних сильним іонно-ковалентним зв'язком усередині сендвіча. При цьому самі сендвічі по осі анізотропії з'єднані слабким Ван-дер-Ваальсовим зв'язком. З метою вивчення впливу локалізованих домішкових нанокластерних утворень на релаксаційні процеси в цих кристалах нами було досліджено залежності спаду амплітуди спінового ехо від інтервалу між радіочастотними імпульсами. Було отримано, що в домішкових кристалах PbJ_2 і CdJ_2 спад амплітуди ехо в залежності від затримки другого радіочастотного імпульсу не є експоненційним. Цей результат свідчить про неоднорідність розподілу нанокристалічних утворень в досліджуваних кристалах.

Література.

1. Mykola Rudka, Martin Orend, Robert Tarasenko, Mariana Karkulovska,

Bohdan Seredyuk, and Nataliia Tovstyuk Structural defects and heat capacity of iodide cadmium Fizyka Nyzkykh Temperatur/Low Temperature Physics, 2025, Vol. 51, № 1, pp. 47–52

Aqueous synthesis and optical properties of CdTe quantum dots with different combinations of MPA and NAC

Klara Verheles, Artur Podhorodecki

*Department of Experimental Physics, Wroclaw University of Science and Technology,
Wybrzeze Wyspianskiego 27, 50-370 Wroclaw, Poland.*

CdTe quantum dots (QDs) are promising nanomaterials for applications in biomedicine, sensing, and photocatalysis due to their high photoluminescence and tunable optical properties [1]. This study investigates the influence of the ligands 3-mercaptopropionic acid (MPA) and N-acetyl-L-cysteine (NAC) on the formation processes and optical characteristics of CdTe QDs synthesized in an aqueous medium.

The CdTe QDs were synthesized in an aqueous solution at pH 12 and 100°C [2]. MPA and NAC were used as ligands in different ratios (from 1:0 to 0:1), and the particle growth dynamics were analyzed over time. Optical properties were studied using UV-Vis spectroscopy, fluorescence spectroscopy, and quantum yield measurements. Structural characteristics were examined by TEM.

Spectral measurements showed that increasing the NAC content in the ligand shell led to a decrease in nanoparticle size, accompanied by a blue shift in the luminescence maxima. The highest quantum yield (66%) was achieved at an MPA:NAC ratio of 1:2, surpassing the values obtained when using either ligand alone. Stability measurements demonstrated that CdTe QDs with this ligand combination retained their luminescence for 29 hours under continuous irradiation, indicating high photostability. TEM analysis confirmed the spherical shape of the nanoparticles, with sizes ranging from 3.4 to 3.6 nm and an interplanar spacing of 0.30–0.35 nm, consistent with the CdTe structure [3].

The results of this study indicate that using a combination of MPA and NAC enables effective control over CdTe QD growth, modification of their optical characteristics, and enhancement of their quantum yield. The optimal ligand ratio (MPA:NAC=1:2) results in nanoparticles with high luminescence, narrow size distribution, and excellent photostability. The aqueous synthesis method in the presence of mixed ligands offers promising opportunities for developing nanomaterials suitable for biomedical and sensing applications.

Funded by the National Science Centre, Poland, within the QuantERA II Programme that has received funding from the European Union's Horizon

2020 research and innovation programme under Grant Agreement No 101017733, project number 2021/03/Y/ST5/00174.

[1] V. Venkatachalam, S. Ganapathy, T. Subramani, I. Perumal. Aqueous CdTe colloidal quantum dots for bio-imaging of *Artemia* sp//Inorganic Chemistry Communications, 2021, 128, 108510

[2] L. Zou, Z. Gu, N. Zhang, Y. Zhang, Z. Fang, W. Zhu, X. Zhong. Ultrafast synthesis of highly luminescent green- to near infrared-emitting CdTe nanocrystals in aqueous phase// J. Mater. Chem., 2008, 18, 2807

[3] G. Li, H. Li, J. Zhai, J. Guo, Q. Li, C.-F. Wang, S. Chen. Microfluidic fluorescent platform for rapid and visual detection of veterinary drugs// Royal Society of Chemistry (RSC Adv.), 2022, 12, 8485

Структура, фазовий склад та магнетизм монокристалів CdTe, імплантованих високими дозами іонів Cr⁺

В.Д. Попович^{1,2}, А.В. Попович¹, І.Д. Столлярчук¹, R. Böttger³, R. Heller³, P. Dluzewski⁴, W. Zajkowska⁴, A. Zywczak⁵, M. Kuzma⁶

¹Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, вул. Івана Франка 24, 82100 Дрогобич, Україна upropovych@dspu.edu.ua

²Національний університет “Львівська політехніка”, вул. С. Бандери 12, 79000 Львів, Україна

³Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden, Germany

⁴Institute of Physics, Polish Academy of Science, Al. Lotników 32/46, 02-668 Warsaw, Poland

⁵AGH University of Science and Technology, 30 A. Mickiewicza Str., 30-059 Krakow, Poland

⁶University of Rzeszow, 1 Pigonia Str., 35-959 Rzeszow, Poland

Принцип роботи традиційних напівпровідникових пристройів базується на явищі електронного транспорту. Однак для їх подальшої еволюції необхідні принципово нові підходи. У цьому контексті спінtronіка, що використовує спін електрона як додатковий ступінь свободи для носіїв, потенційно пропонує такі переваги, як вища швидкодія, зменшення розмірів активних елементів та знижене енергоспоживання. Одними з найперспективніших матеріалів для реалізації цього підходу вважаються магніторозчинені напівпровідники. Зокрема, було теоретично передбачено, що твердий розчин заміщення Cd_{1-x}Cr_xTe з високим значенням x повинен володіти значним високотемпературним феромагнетизмом [1]. Проте наші попередні дослідження довели, що рівноважна розчинність хрому у телуріді кадмію не перевищує 0,1 ат. % [2]. Це призводить до сепарації домішкової фази та утворення масиву кристалографічно орієнтованих квазі-двовимірних преципітатів моноклінного Cr₃Te₄ у сильнолегованих кристалах CdTe:Cr, вирощених модифікованим методом переносу через газову фазу [3].

З метою введення більшої концентрації атомів Cr у решітку цієї сполуки, ніж це досягається в умовах рівноважного росту, було використано метод іонної імплантациї [4]. Монокристалічні зразки CdTe імплантували іонами Cr⁺ з енергією 500 кeВ і флюенсах 10¹⁶, 10¹⁷ та 5·10¹⁷ см⁻². Вплив імплантациї на структуру, хімічний та фазовий склад зразків досліджували за допомогою методів скануючої електронної мікроскопії, енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії, рентгенівської дифракції, вторинної іонної мас-спектрометрії та спектрометрії резерфордівського зворотного розсіювання.

Дослідження показали, що загальний вигляд профілів розподілу імплантованих іонів по глибині достатньо добре узгоджуються з

прогнозованими за допомогою формалізму Шульца-Вітмака [5]. Проте дифузія легуючої домішки безпосередньо у процесі імплантациї значно змінює цей розподіл, призводячи до її накопичення на поверхні зразків. Крім того, для найвищого флюенсу спостерігалося значне розширення мішенні, що є обмежуючим фактором для сильного легування. Було виявлено, що поверхневі шари зразків, опромінених дозами у 10^{16} та 10^{17} см⁻², практично не порушуються внаслідок імплантациї, у той час як спричинене опроміненням розупорядкування поширюється набагато далі вглиб кристалів, ніж це очікувалося, виходячи із теоретичних розрахунків. У зразках, опромінених дозами 10^{17} та $5 \cdot 10^{17}$ см⁻², спостерігалася преципітація кристалів фази α -Cr. Кристалографічна орієнтація цих преципітатів відносно матриці-хазяйна є наступною: $(110)_{\text{Cr}} \parallel (110)_{\text{CdTe}}$.

Вимірювання намагніченості та електронного парамагнітного резонансу виявили слабкий феромагнетизм імплантованих зразків як за температури рідкого азоту, так і за кімнатної. Оскільки металевий хром є парамагнетиком, а концентрація замісничих атомів Cr у гратці CdTe є занадто низькою, то для визначення природи феромагнетизму були проведені додаткові дослідження з використанням методу високороздільної трансмісійної електронної мікроскопії. Вони дозволили виявити для двох найвищих застосованих флюенсів ізометричні преципітати Cr_3Te_4 , розміри яких, на відміну від випадку рівноважного легування під час росту об'ємних кристалів CdTe:Cr, не перевищують декілька нанометрів.

Отже, хоча у імплантованих зразках було виявлено значно більший вміст хрому порівняно з кристалами CdTe:Cr, вирощеними рівноважними методами, проте виділення домішкової фази та радіаційне розупорядкування перешкоджають отриманню однорідного магніторозчиненого напівпровідника шляхом імплантациї іонами Cr⁺. Проте з іншого боку, Cr_3Te_4 вважається одним з найперспективніших двовимірних магнетиків [6], інтеграція якого у напівпровідникову матрицю телуриду кадмію потенційно дасть можливість одержати нанокомпозит, придатний для застосувань у галузі спінtronіки [7].

1. J. Blinowski, P. Kacman, J.A. Majewski *J. Cryst. Growth* **96** (1996) 972.
2. V.D. Popovych, P. Sagan, M. Bester, B. Cieniek, M. Kuzma *J. Cryst. Growth* **426** (2015) 173.
3. K. Morawiec, V.D. Popovych, W. Zajkowska, P. Dluzewski, A. Zywczak, P. Sagan, Yu.Yu Skvarok., M. Kuzma, M. Shiojiri *J. Mater. Sci.* **58** (2023) 5705.
4. V.D. Popovych, R. Böttger, R. Heller, S. Zhou, M. Bester, B. Cieniek, R. Mroczka, R. Lopucki, P. Sagan, M. Kuzma *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B* **419** (2018) 26.
5. F. Schulz, K. Wittmaack, Radiat. Effects 29 (1976) 31.
6. J. Yang, C. Zhu, Y. Deng, B. Tang, Z. Liu *iScience* **26** (2023) 106567.
7. T. Dietl, K. Sato, T. Fukushima, A. Bonanni, M. Jamet, A. Barski, S. Kuroda, M. Tanaka, P.N. Hai, H. Katayama-Yoshida *Rev. Modern Phys.* **87** (2015) 1311.

Peculiar Behavior of Cr³⁺ Luminescence in Cr:GGG Transparent Nanoceramics

Mykhailo Chaika* and Paweł Głuchowski

Institute of Low temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences, Okólna 2, 50–422 Wrocław, Poland
m.chaika@intibs.pl

In recent years, Cr-doped garnets have attracted considerable attention due to their unique properties. However, interpreting the spectroscopic features of Cr³⁺ ions in garnet structure remains challenging, primarily because of the wide variation in crystal field strength, which results in Cr³⁺ ions occupying octahedral sites with different local environments. This complexity is also relevant for nanostructured materials such as Cr³⁺-doped nanopowders. Despite extensive studies, many questions regarding the luminescence behavior of Cr³⁺ ions in such nanomaterials remain unclear.

In this work, we report on the optical properties of Cr³⁺:GGG (Gadolinium Gallium Garnet) nanoceramics synthesized using high isostatic pressure (HIP) method at relatively low temperature [1]. Cr:GGG nanoceramics doped with 0.1 at.%, 0.2 at.%, and 0.3 at.% Cr³⁺ ions were obtained. The synthesized materials consist of crystallites with an average size of 17 nm and a mean lattice parameter of ~12.40 Å.

High temperature emission spectra reveal the presence of at least four different (CrO₆)⁹⁻ optical active centers in the Cr:GGG nanoceramics. The appearance of R-lines satellites indicates a non-uniform distribution of local crystal fields around Cr³⁺ ions. Interestingly, varying the Cr³⁺ concentration did not affect the room-temperature optical properties: excitation, emission spectra, lifetimes, and Racah parameters. However, low-temperature emission spectra showed a dependence on chromium concentration.

An increase in Cr³⁺ content enhanced the intensity ratio of broadband ⁴T_{2g}(⁴F) emission to total Cr³⁺ luminescence, without affecting the peak position or bandwidth of ⁴T_{2g}(⁴F)→⁴A_{2g}(⁴F) transition. This behavior is attributed to energy transfer between chromium ions occupying sites with different local crystal field strength. Specifically, Cr³⁺ ions in weak crystal fields are more likely to emit photons directly rather than transfer their excitation energy to nearby Cr³⁺ ions. Therefore, high Cr³⁺ ions concentration promotes more efficient energy transfer, leading to an increased contribution from low-field sites in the overall luminescence.

This work was supported by NCN, grant: OPUS 23 Nr UMO-2022/45/B/ST5/01487 and European Commission grant: HORIZON-MSCA-2023-SE-01 – MSCA SE 2023 (ALTER-Q, project nr 101182995).

[1] Głuchowski, P., & Chaika, M. (2024). Crystal-Field Strength Variations and Energy Transfer in Cr³⁺-Doped GGG Transparent Nanoceramics. *The Journal of Physical Chemistry C*, 128(23), 9641-9651.

EPR study of paramagnetic to spin-glass transition in $Zn_{1-x}Mn_xSe:Fe^{2+}$ single crystals

A.V. Uriadov¹, D.V. Savchenko^{1,2}, I.V. Ivanchenko³, N.A. Popenko³, B.E. Bekirov³, E.N. Kalabukhova⁴

¹National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute" 37, Beresteiskyi Avenue, 03056 Kyiv, Ukraine, a.uriadov@kpi.ua

²Technical Center NAS of Ukraine, 13 Pokrovs'ka str., 04070 Kyiv, Ukraine

³O. Usikov Institute for Radiophysics and Electronics, NAS of Ukraine,
12, Proskura str., 61085 Kharkiv, Ukraine

⁴V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine,
41, prosp. Nauky, 03028 Kyiv, Ukraine

Diluted magnetic semiconductors (DMS) are materials that combine semiconducting and magnetic properties, essential in spintronics for data processing and storage [1]. They are promising for high-density, energy-efficient devices like MRAM and sensors, with operational stability derived from superexchange interactions and spin-orbit coupling [2]. An exemplary instance of DMS is $Zn_{1-x}Mn_xSe$, where Mn ions replace Zn ions, resulting in localized magnetic moments. The inclusion of Fe^{2+} ions enhances the material's magnetic behavior.

Electron paramagnetic resonance (EPR) effectively investigates DMS magnetic properties, tracking magnetic ions' behavior under a magnetic field and temperature-dependent spin dynamics. EPR also detects the paramagnetic-to-spin glass transition through resonance shifts and linewidth changes, marking slowing spin dynamics and spin freezing.

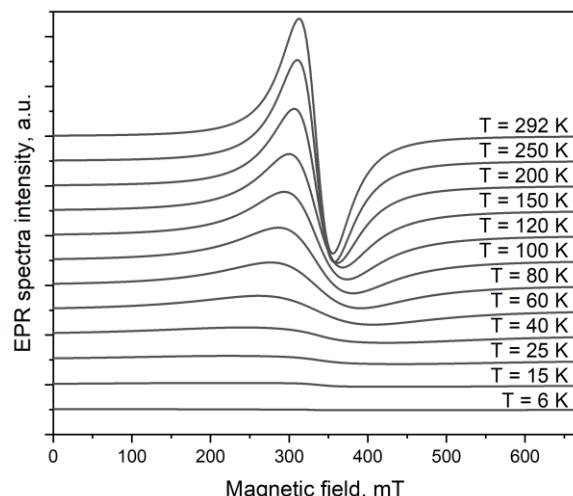


Fig. 1. Temperature dependence of X-band EPR spectra measured in $Zn_{1-x}Mn_xSe:Fe^{2+}$ crystals with $x = 0.3$.

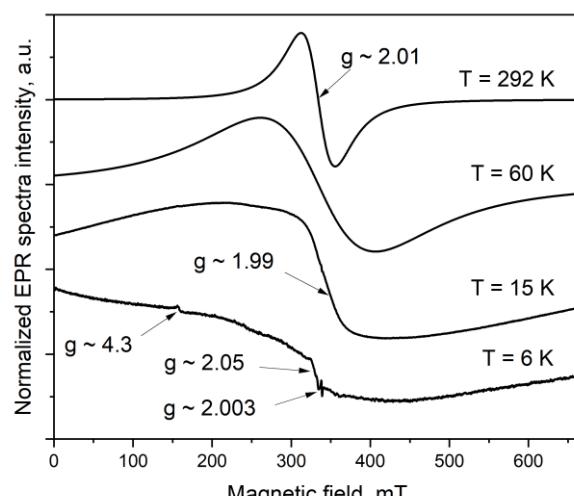


Fig. 2. EPR spectra for $Zn_{1-x}Mn_xSe:Fe^{2+}$ crystals with $x=0.3$. The EPR spectra intensity was normalized to its maximum value.

The comprehensive EPR analysis of $Zn_{1-x}Mn_xSe:Fe^{2+}$ single crystals with $x = 0.3$ examines the temperature-dependent evolution of the EPR

spectra (Fig. 1), shedding light on the transition from a paramagnetic state to a spin glass state. This transition is evidenced by the broadening and a decrease in amplitude of a single Lorentzian resonance line at $g \sim 2.01$, with the critical freezing temperature occurring near 8.0 K. At temperatures below this threshold, the EPR spectra reveal the presence of three distinct magnetic centers: Fe^{3+} ions at $g \sim 4.3$, strongly interacting Fe ions at $g \sim 2.05$, and a vacancy-related center at $g \sim 2.003$ (Fig. 2).

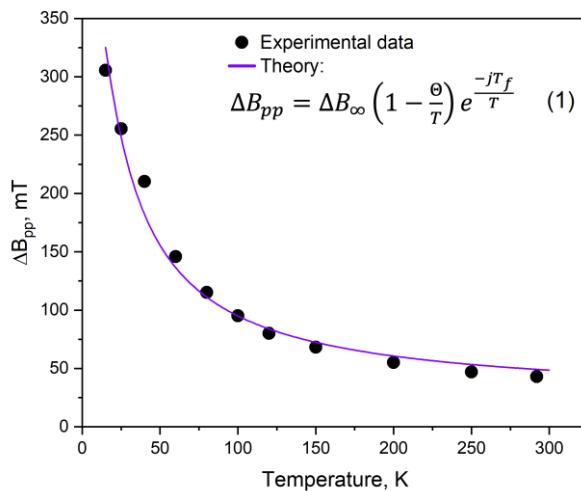


Fig. 3. Temperature dependence of linewidth for broad EPR signals measured in $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}:\text{Fe}^{2+}$ crystals with $x = 0.3$ presented in Fig. 1.

The temperature dependence of the peak-to-peak linewidth (ΔB_{pp}) for the broad EPR signal according to [3] can be described as Eq. (1) shown in Fig. 3, where ΔB_∞ is the linewidth of the signal at very high temperatures, Θ is the Curie temperature, j is equal to +1 for a micromagnetic (spin glass) system and -1 for an antiferromagnetic ordering, and T_f is freezing or Néel temperature. The parameters obtained by fitting Eq. (1) with experimental data shown in Fig. 3 are: $\Delta B_\infty = 23.3$ mT, $\Theta = -341.8$ K, $T_f = 8$ K, $j = 1$.

The results demonstrate that iron doping facilitates Mn clustering and stabilizes the spin-glass phase, hence influencing the magnetic characteristics of $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}:\text{Fe}^{2+}$. The insights obtained here offer significant information on dopant-induced magnetic phase transitions in dilute magnetic semiconductors, emphasizing potential applications in spintronics where controlled magnetic states are vital.

- [1]. J. M. Baruah, J. Narayan, Dilute Magnetic Semiconducting Quantum Dots: Smart Materials for Spintronics, Chap. 11 in Nonmagnetic and Magnetic Quantum Dots, Eds. V. N. Stavrou, pp. 187-199, IntechOpen, London, UK (2018) <https://doi.org/10.5772/intechopen.73286>.
- [2]. Zhao G.Q., Deng Z., Jin C.Q. Advances in new generation diluted magnetic semiconductors with independent spin and charge doping. *J. Semicond.* 2019. 40, No 8. P. 081505. <https://doi.org/10.1088/1674-4926/40/8/081505>.
- [3]. Silva P., Fermin J., Chourio M., Betancourt L., Sagredo V. EPR measurements on the $\text{CuCd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{GeSe}_4$ diluted magnetic semiconductor. *Cryst. Res. Technol.* 1996. 31, P. 569-573.

ПИТОМА ЕЛЕКТРИЧНА ПРОВІДНІСТЬ ТА ЕЛЕКТРИЧНИЙ ОПІР КРИСТАЛІВ SbSJ .

ТЯГУР Ю. Л., НЕБОЛА І. І.

*ДВНЗ «Ужгородський національний університет», 88000 Ужгород, Україна,
e-mail : yuriii.tjahur@uzhnu.edu.ua*

Відома, залежність питомої електричної провідності $\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{d}{R \cdot S} = \frac{d \cdot I}{U \cdot S} = \frac{J}{E}$, (1) власного напівпровідника, що визначається концентрацією носіїв заряду і їх рухливістю, тобто: $\sigma = e n_0 \mu_n + e p_0 \mu_p = \sigma_i(T) = e \cdot n_i(T) \cdot (\mu_n(T) + \mu_p(T))$, (2) μ_n – рухливість електронів, μ_p – рухливість дірок, e – заряд електрона. $n_i^2 = (n_0 \cdot p_0)$ – концентрація носіїв заряду власного напівпровідника. Її температурна залежність виражається рівнянням

$$\sigma_i(T) = e \cdot (\mu_n + \mu_p) \cdot 2 \cdot (m_0^2)^{3/4} \cdot \left(\frac{2\pi k}{h^2} \right)^{3/2} \cdot \left(\frac{m_n^* \cdot m_p^*}{m_0 \cdot m_0} \right)^{3/4} \cdot T^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{E_{gi}}{2kT}\right) \dots (5)$$

Експериментальні залежності для напівпровідникових кристалів *SbSJ* в інтервалі температур (280 – 353), К приведені на (Рис 1, 2). Для залежності $\sigma_i(T)$ записаної у вигляді (6), дозволяє визначити константи E_{g0} , B , w .

$$\sigma_i(T) = A \cdot T^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{E_{gi}}{2kT}\right) \approx \sigma_{0i} \cdot \exp\left(-\frac{E_{g0}}{2kT}\right) = \sigma_{0i} \cdot \exp\left(-\frac{B}{T}\right) = \sigma_{0i} \cdot \exp\left(-\frac{w}{kT}\right) \dots (6)$$

$$E_{g0} = 2 \cdot k \cdot B = 2 \cdot 0.8617 \cdot 10^{-4} \left[\frac{eV}{K} \right] \cdot B[K], \quad (7). \quad E_{gi} = E_{g0} - \frac{dE_{gi}}{dT} \cdot T, \quad (8).$$

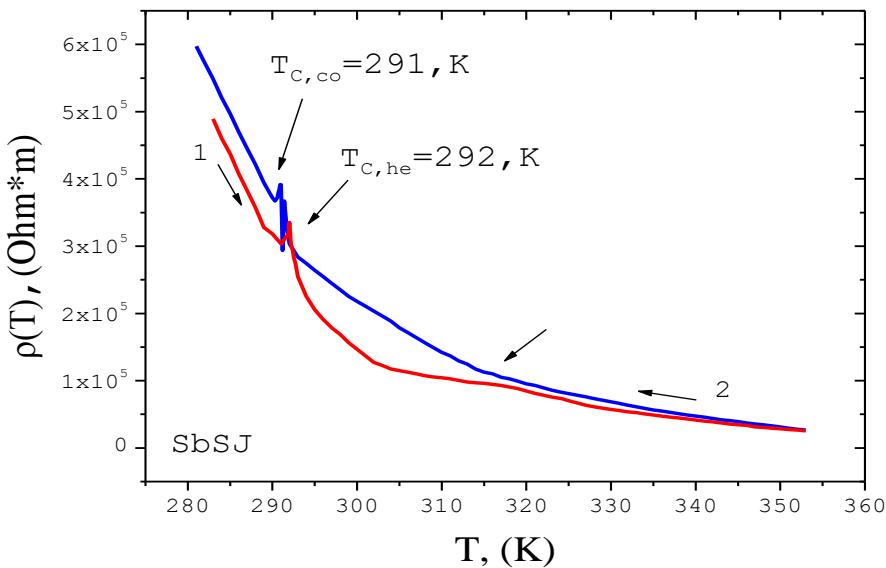


Рис. 1. Температурна залежність питомого електричного опору $\rho(T)$ монокристала *SbSJ* в напрямку осі (C) в інтервалі температур (280 – 353), К в режимі нагрівання крива 1 та режимі охолодження крива 2.

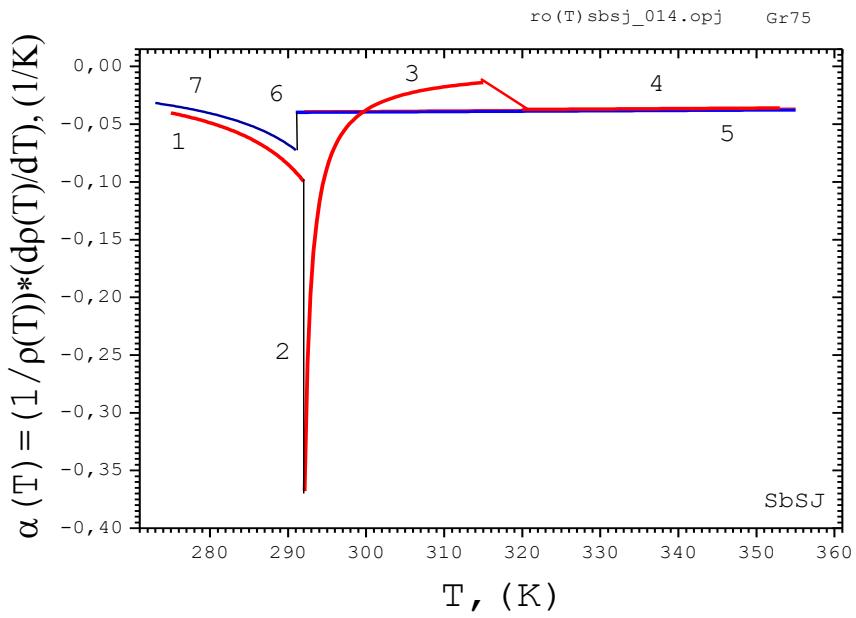


Рис.2. Температурна залежність відносного температурного коефіцієнта питомого електричного опору $\alpha(T)$ монокристала $SbSJ$ в напрямку осі (C) в інтервалі температур $(275 - 353), K$ в режимі нагрівання криві 1, 2, 3, 4 (червоні) та режимі охолодження криві 5, 6, 7 (сині).

Експериментальні залежності питомого електричного опору виражаються рівнянням $\rho(T) = \frac{1}{\sigma(T)} = \rho_0(T_0) \cdot \exp\left(B \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right)$ (9), а відносний коефіцієнт $\alpha(T)$, температурної залежності питомого електричного опору, рівнянням $\alpha(T) = -\frac{B}{T^2}$, (10). Однак вони не задовільно описують експериментальні залежності $\rho(T)$ та $\alpha(T)$, особливо в сегнето фазі (Рис.2). Задовільного узгодження між експериментальними кривими в діапазоні температур $(281 \leq T \leq 290, K)$ при охолодженні сегнето- фази, може бути досягнуто при використанні емпіричної степеневої залежності (11), де у рівнянні (11), $P1 = ((8,792 \pm 1,262) \cdot 10^6, Ohm \cdot m)$, $P2 = (306,1 \pm 1,5)K$, $P3 = (1,074 \pm 0,081)$.

$$\rho(281 \leq T \leq 290, K)_{co, fe} = P1 \cdot \left(1 - \frac{T}{P2}\right)^{P3} = ((8,792 \pm 1,262) \cdot 10^6, Ohm \cdot m) \cdot \left(1 - \frac{T}{(306,1 \pm 1,5)K}\right)^{(1,074 \pm 0,081)} \quad (11)$$

При охолодженні сегнето - фази відносний температурний коефіцієнт $\alpha(T) = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\rho}{dT}$, добре описується рівнянням (12) де $A1 \approx (-P3/P2)$, $A2 \approx P2$, $A3 \approx 1$.

$$\alpha(281 \leq T \leq 290, K)_{co, fe} = A1 \left(1 - \frac{T}{A2}\right)^{A3} = (-0,0033 \pm 0,0002), (1/K) \left(1 - \frac{T}{(305,0 \pm 1,4), K}\right)^1 \quad (12)$$

Для $\alpha(273, K)_{co, fe} \approx (-0,0317), (1/K)$.

Для

$$\rho(273, K)_{co, fe} = (0,805 \pm 0,115) \cdot 10^6, (Ohm \cdot m)$$

Інженерія дефектів у графенових квантових точках: підхід на основі машинного навчання

A.В. Тужиков¹, Т.С. Кавецький^{1,2,3}, О. Шауша^{3,4}, А.Ю. Ків¹, В.М. Соловйов^{1,5}

¹*Південноукраїнський національний педагогічний університет
імені К.Д. Ушинського, 65020 Одеса, Україна*

²*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
82100 Дрогобич, Україна*

³*Інститут фізики Словацької академії наук, 84511 Братислава, Словаччина*

⁴*Відділ ядерної хімії, Університет Коменського, 84215 Братислава, Словаччина*

⁵*Криворізький державний педагогічний університет, 50000 Кривий Ріг, Україна*

e-mail: andrewtuzhykov@gmail.com

У даній роботі представлено інтегрований обчислювальний підхід для дослідження структурних та електронних властивостей дефектів у графенових квантових точках (ГКТ). Використовуючи сучасні методи машинного навчання та нейронні мережі, ми розробили фреймворк [1] для прогнозування енергії формування різних типів дефектів та їх впливу на електронні властивості. Обчислювальний фреймворк, розроблений у нашій роботі, базується на універсальному потенціалі міжатомної взаємодії Orb-v3 [2], який поєднує високу точність квантово-механічних методів з обчислювальною ефективністю емпіричних силових полів. Orb-v3 демонструє значне прискорення обчислень ($>10x$) та зменшення використання пам'яті ($>8x$) порівняно з альтернативними моделями, зберігаючи при цьому точність наближену до розрахунків з перших принципів. Робочий процес включає генерацію структур, оптимізацію геометрії, характеризацію дефектів та аналіз електронної структури.

Початкові структури ГКТ різних розмірів і форм створюються програмно, після чого проводиться оптимізація геометрії за допомогою алгоритму FIRE з критерієм збіжності сили $0,05 \text{ eV}/\text{\AA}$. Після отримання структур основного стану, ми систематично вводимо різні типи дефектів і досліжуємо їх властивості. У роботі досліджено три основні типи дефектів: моновакансії, дівакансії та дефекти Стоуна-Уельса (утворюються через поворот зв'язку C-C на 90° , що веде до реконструкції гексагональної решітки з утворенням двох п'ятикутників і двох семикутників). Наші розрахунки показують, що енергія формування дефектів значно залежить від їхнього положення у квантовій точці. Аналіз карт енергії формування демонструє неоднорідний розподіл цієї величини. Важливим спостереженням є те, що краї типу armchair демонструють більшу стабільність порівняно з краями типу zigzag. Це проявляється у нижчих значеннях енергії формування вакансій на armchair-краях. Такий результат узгоджується з експериментальними даними, отриманими за допомогою методів

атомно-силової мікроскопії та скануючої тунельної мікроскопії, і пояснює преференційне формування armchair-країв під час росту графенових структур.

Окрім дослідження нативних дефектів, ми проаналізували процеси функціоналізації ГКТ, які можуть відбуватися як природним шляхом під час вирощування, так і цілеспрямовано. Наш фреймворк дозволяє моделювати приєднання різних функціональних груп (-OH, -COOH, -NH₂) та атомів (O, N) до графенового каркасу і прогнозувати зміни в електронній структурі. Відомо, що присутність хімічних груп може сприяти утворенню вакансій, як показано в роботі [3], де спостерігалось, що приєднання функціональних груп до графену часто супроводжується формуванням дефектів.

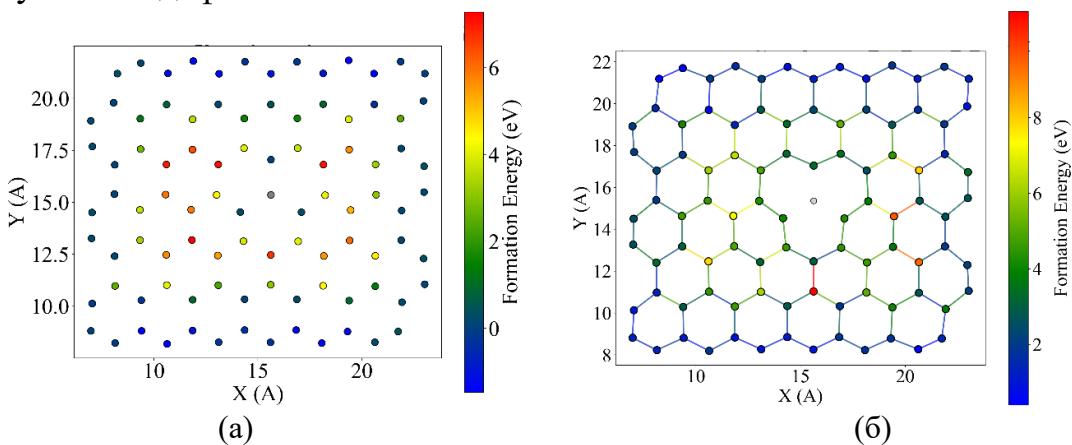


Рис. 1. (а) Розподіл енергії формування моновакансій, що чітко демонструє різницю між енергетично менш вигідними положеннями у центрі (4-6 eВ) та енергетично вигідними на краях (0-2 eВ); (б) Розподіл енергії формування дивакансій з візуалізацією гексагональної структури графену, де максимальні значення енергії (8-10 eВ) спостерігаються у центральній частині структури, а мінімальні (0-2 eВ) – на краях, особливо типу armchair.

Цілеспрямоване введення дефектів та функціоналізація відкривають шлях до створення графенових матеріалів з покращеними або новими властивостями. Наприклад, функціоналізація азотом може перетворити напівметалевий графен на напівпровідник з контролюваною шириною забороненої зони, що є ключовим для застосування у фотоніці та електроніці.

Дана робота частково підтримана МОН України (№ 0122U000850, 0122U000874, 0122U001694, 0125U002005, 0125U002033), Slovak Grant Agency VEGA (№ 2/0166/22, 2/0131/25), Slovak Research and Development Agency (№ APVV-21-0335). Т.К. висловлює подяку SAIA за підтримку стажування в рамках програми NSP Словацької Республіки. Данна робота також підтримана проектом MSCA4Ukraine (№ 1128327), який фінансується Європейським Союзом.

1. A. Tuzhykov *et al.*, Chapter 4, 2025, <https://link.springer.com/book/9789402423150>.
2. B. Rhodes *et al.*, arXiv.-2025.-arXiv:2504.06231v2 [cond-mat.mtrl-sci].
3. K. Kim *et al.*, Nat. Commun. 4 (2013) 2723.

PF and SCL Conduction Mechanisms in Amorphous SiCN Films

V.V. Tetyorkin, A.I. Tkachuk¹, O.K. Porada²

V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS Ukraine, Kyiv, Ukraine

¹V. Vynnychenko Central Ukrainian State University, Kropyvnytskyi, Ukraine

²Institute for Problems of Materials Sciences NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

SiCN ternary compounds are recognized as a promising material for application in modern semiconductor electronics due its excellent high-temperature physical properties, low value of electric permittivity, high chemical, radiation and mechanical stability over a wide temperature range. Thin amorphous SiCN films can be deposited on semiconductor substrates at a sufficiently low temperature, which allows them to be used for passivation and surface protection of infrared devices. The studied films were deposited on *p*-Si, InSb and GaAs substrates by plasma chemical vapor deposition using hexamethyldisilazane as the main precursor [1]. The steady-state current was measured as a function of the bias voltage, temperature, and film thickness. At an external electric field $F \leq 1 \cdot 10^5$ V/cm, the dark conductivity was found to be due to the space charge limited (SCL) current induced by electron injection. Depending on the deposition conditions, shallow and deep donor-type traps were found to be responsible for the SCL current. In the case of deep traps it is confined by the so-called Lampert triangle. Band and trap parameters (mobility and concentration of electrons, density and energy of trap states) were estimated from the SCL current measurements.

Conduction mechanism was changed at electric fields $F > 5 \cdot 10^5$ V/cm. At temperatures $T < 250$ K it can be explained by the Pool-Frenkel emission. The experimental I - V characteristics were linearized in the PF coordinates $\ln(I/F) - F^{1/2}$ and their slope was close to the theoretically calculated value $J_{PF}/2kT$, where $J_{PF} = (e^3/\pi\epsilon_0\epsilon_\infty)^{1/2}$ is the PF constant, Fig. 1. For the singly ionized trap the Poole-Frenkel current density is given by [2]:

$$J_{PF} = en_0\mu F \exp\left(\frac{\Delta\Phi_{PF}}{kT}\right), \quad (1)$$

where n_0 is the thermally equilibrium concentration of electrons, μ is the electron mobility, and $\Delta\Phi_{PF} = J_{PF}F^{1/2}$. The straight line in Fig. 1 is calculated for the experimentally determined n_0 , μ and $\epsilon_\infty = 4$.

In general, in strong electric fields ionization of deep centers can occur due to the PF emission, the phonon-assisted tunneling, and the direct tunneling. There are two opposing approaches to the charge states of deep traps in PF emission. Traditionally, a Coulomb trap, usually a donor trap, is considered neutral when filled with an electron and positively charged when

an electron is released from it. For traps that are charged when filled and neutral when empty, there is no Coulomb interaction between electrons and capture centers [2]. According to [3], the PF effect takes place only for charged traps, while phonon-assisted tunneling and direct tunneling are possible for defects in all charge states. Experimental results are discussed in terms of both conduction mechanisms.

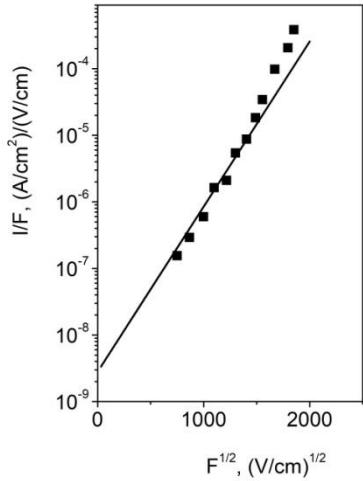


Fig.1. PF plots of ~400 nm thick SiCN films deposited on *p*-Si substrates. The straight line was calculated using equation (1).

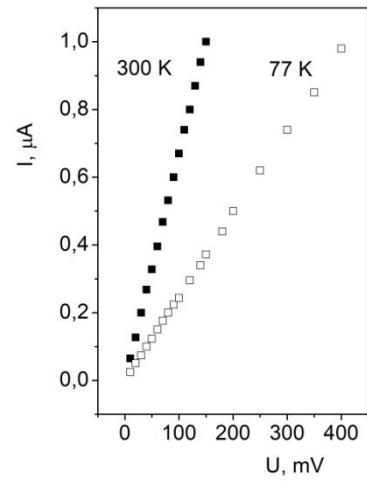


Fig. 2. Current-voltage characteristics of a ~200 nm thick SiCN film grown on *n*-InSb.

An important feature of SiCN material is its ability to be doped. Doping SiCN with boron leads to an increase in *p*-type conductivity of ~0.1 Ω·cm at room temperature, compared to ~10⁻⁷ Ω·cm in the undoped material [4]. The experimental data shown in Fig. 2 were obtained for a SiCN film grown on a single-crystal *n*-InSb substrate. The doping effect of the substrate can be explained by the interdiffusion of the volatile component (Sb) during film growth.

1. A.V. Sukach, V.V. Tetyorkin, A.I. Tkachuk, A.O.Kozak, O.K.Porada, V.I. Ivashchenko. *Mat. Sci. Semicond. Proc.*, **143**, 106515 (2022).
2. H. Schroeder, Poole-Frenkel-effect as dominating current mechanism in thin oxide films – An illusion? *J. Appl. Phys.*, **117**, 215103 (2015).
3. S.D. Ganichev, E. Ziemann, W. Prettler et al. *Phys. Rev. B.*, **61**, 10361 (2000).
4. P.A. Ramakrishnan, Y. T. Wang, D. Balzar, et al. Silicoboron–carbonitride ceramics: A class of high-temperature, dopable electronic materials. *Appl. Phys. Lett.*, **78**, 3076 (2001).

Вплив умов сульфідування на хімічний склад поверхні HgCdTe для ІЧ і ТГц приймачів

Свеженцова К.В., Цибрій З.Ф., Сапон С.В., Смолій М.І., Сабов Т.М., Дмитрук Н.Д.,
Пантелеев О.Г.

*Інститут фізики напівпровідників ім. В.С. Лашкарьова НАН України,
03028, м. Київ, пр. Науки, 41*

Приповерхневі шари є основною робочою областю в напівпровідникових приладах опто- та мікроелектроніки і від стану поверхні будуть залежати їх функціональні характеристики. У порівнянні з об'ємом в них відбуваються зміни фізичних процесів внаслідок наявності поверхневого потенціалу, зміни структурної досконалості, зонної структури, рухливості та генераційно-рекомбінаційних процесів носіїв заряду. Для усунення небажаного впливу поверхневих станів у напівпровідникових приладах використовується пасивація поверхні. Одним з методів пасивації є сульфідування, що дозволяє стабілізувати електронний стан поверхні та досягнути вищих робочих параметрів пристройів електронної техніки. На відміну від інших методів пасивації, сульфідна пасивація є низькотемпературним процесом, що робить її більш технологічною, доступною та придатною для випадків температурних обмежень при проведенні технологічних процесів. У літературі інтенсивно досліджується можливість сульфідування поверхні різних напівпровідників A_2B_6 , A_3B_5 та потрійних сполук, у безводних та водневих сульфурвмісних розчинах [1]. Деякі дослідження по сульфідуванню вже широко використовуються при створенні приладів, наприклад, на основі InSb, GaAs, CdS та інших. Незважаючи на значну кількість досліджень, сульфідна пасивація для HgCdTe практично не висвітлена в літературі.

В даній роботі досліджено можливість застосування сульфідування поверхні HgCdTe в проміжних технологічних процесах виготовлення приймачів ІЧ та ТГц випромінювання. Процес сульфідування поверхні HgCdTe проводився у водному 1M розчині Na_2S зі змінними параметрами часу обробки, температури та лужності розчину. Елементний склад на сульфідований поверхні досліджувався методом рентгенівської фотоелектронної спектроскопії (XPS).

Результати XPS свідчать, що сульфідування не супроводжується травленням поверхні, а веде до видалення природного оксиду з одночасним утворенням сульфідного пасиваційного шару. Відбувається формування надтонкого стабільного шару CdS (один або кілька атомних шарів) на поверхні HgCdTe внаслідок реакції з сірковмісними розчинами. Цей шар пригнічує окиснення та забезпечує подальше необхідне структурно-хімічне поєднання напівпровідника із зовнішнім

діелектриком або металом в подальших процесах пасивації та металізації. На спектрах XPS не виявлено сульфідів ртуті, а наявна ртуть присутня в металічній формі. В таблиці 1 приведені концентрації домішок на поверхні, визначені з оглядових спектрів XPS.

Таблиця 1. Концентрації домішок на поверхні HgCdTe при різних обробках, визначені зі спектрів XPS.

№ зразка	0, Необроблений	1, Травлення HCl	2, Сульфідування $\text{Na}_2\text{S} \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, $T=60^\circ\text{C}$	3, Сульфідування $\text{Na}_2\text{S} \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, $T=70^\circ\text{C}$	4, Сульфідування $\text{Na}_2\text{S} \cdot 9\text{H}_2\text{O} + \text{KOH}$
Cd, at.%	3,06	0,78	8,76	10,41	10,79
Hg, at.%	7,73	3,65	11,47	12,75	17,56
Te, at.%	6,39	18,18	15,95	16,14	26,17
S, at.%	-	-	6,19	6,05	9,56
O, at.%	24,1	9,71	8,33	8,48	6,46

На рис 1 приведені нормалізовані концентрації основних компонентів визначені із високороздільних спектрів XPS.

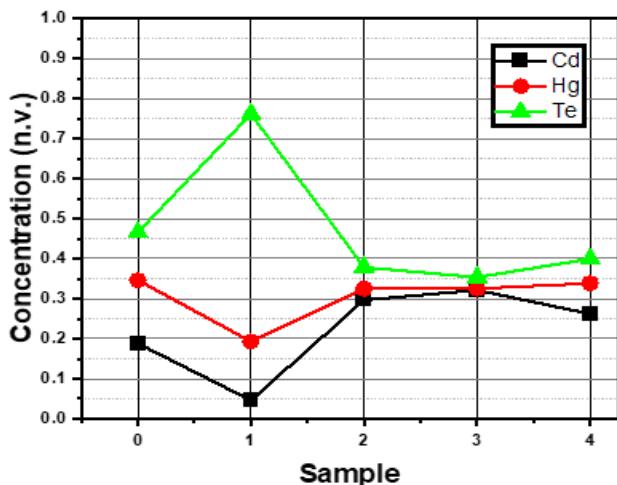


Рис. 1. Нормалізовані концентрації основних компонентів, визначені з високороздільних спектрів XPS.

Аналізуючи зміну елементного складу поверхні HgCdTe (табл.1 та

рис. 1) встановлено, що сульфідування сприяло стабілізації та вирівнюванню концентрацій основних елементів, зниженню вмісту кисню (з 24,1% до 6,46%) й підвищенню концентрації сірки, особливо за умов підвищеного pH розчину.

Отже, в роботі підібрані оптимальні режими сульфідування, які дозволили значно покращити пасиваційні властивості поверхні HgCdTe у швидких проміжних технологічних процесах.

- [1] V. Tetyorkin, Z. Tsybrii, A. Tkachuk, M. Vuichyk, K. Svezhentsova, A. Yevmenova, N. Dmytruk. Passivation of InSb and HgCdTe Infrared Photodiodes by Polycrystalline CdTe. *J. Electron. Mater.* V. 52, 7337–7345 (2023). <https://doi.org/10.1007/s11664-023-10671-9>.

Оптичні та фотоелектричні елементи на основі In_4Se_3 , модифіковані в області лазерного впливу

М.О. Сорокатий, В.М. Стребежев, І.М. Юрійчук, Ю.Б. Халавка, Д.А. Бурченко
*Чернівецький національний університет імені Юрія Федъковича,
м. Чернівці, вул. Коцюбинського 2, Україна*

Особливості шаруватої структури та енергетичної будови напівпровідниківих кристалів In_4Se_3 (ширина забороненої зони $E_g=0,65$ еВ) зумовлюють їх використання для створення елементної бази оптичної техніки близького та середнього ІЧ-дапазону [1]. Атомарно гладка поверхня площини спайності (100) оптимальна як для нарощування епітаксійних шарів і гетеропереходів, так і для напилювання тонкоплівкових моно- чи багатошарових оптичних покривів для просвітлення або фільтрації випромінювання. В зв'язку з інтенсивним розвитком наноелектроніки досліджуються технологічні та фізичні основи мікро- та наноструктурування цих шаруватих кристалів, в тому числі методи лазерної обробки (ЛО) та модифікації поверхні і переходів областей.

Структурно досконалі, нелеговані монокристали In_4Se_3 мають високий коефіцієнт пропускання, до 60-63% в області прозорості без просвітлення. Тому нами були теоретично розраховані та виготовлені інтерференційно-абсорбційні фільтри у вигляді мультишарів з плівок Ge – MgF₂ та Ge-SiO, які напилювали на чисті сколи (100) кристалів In_4Se_3 . Границя довжина хвилі таких відрізних фільтрів складала $\lambda_{\text{тр}} = 2,0$ мкм та $\lambda_{\text{тр}} = 3,5$ мкм. Корекція параметрів фільтрів, таких як максимальне пропускання в робочому діапазоні, спектральне положення $\lambda_{\text{тр}}$, міжшарова адгезія та адгезія до підкладки проводилася методом лазерної обробки і відпалу в режимі малої густини енергії пучка $E=0,3$ - $0,8$ Дж/см². Для заданої зміни спектральної характеристики інтерференційного фільтра достатньо корегувати оптичні товщини кількох плівок на межі із оточуючим середовищем, при цьому основний пакет чвертьхвильових плівок залишається незмінним. Застосувалася розфокусована дія мілісекундного YAG-лазера з $\lambda_0 = 1,06$ мкм на верхні плівки фільтра, в яких енергія імпульсу значним чином поглинається в шарах Ge. При такому лазерному відпалі відбувається зміна показників заломлення верхніх плівок, що дозволяло підібрати такий режим ЛО, при якому на 7-10% зростало максимальне пропускання багатошарового фільтру.

Також було проведено створення фоточутливих елементів на кристалах In_4Se_3 з допомогою лазерних технологій. В першому випадку проводилася проплавка лазером поверхні кристалу n-In₄Se₃. В області лазерного впливу при цьому не змінюється склад In₄Se₃, на що вказують

дослідження в РЕМ (рис. 1), але інвертується провідність рекристалізованого шару в р-типу.



Рис. 1. Однорідність складу поверхні кристалу In_4Se_3 в областях лазерної проплавки.

В другому випадку на поверхні кристалу n-In₄Se₃ методом рідинної епітаксії (РЕ) нарощувався шар p-In₄Te₃, який модифікувався лазерним опроміненням з використанням мілісекундних лазерів на рубіні ($\lambda = 0,694 \text{ мкм}$) та на YAG ($\lambda = 1,06 \text{ мкм}$). Гетероструктури In₄Te₃-In₄Se₃, отримані методом РЕ, та структури p-In₄Se₃-n-In₄Se₃, отримані методом лазерної проплавки, характеризуються значною фоточутливістю в області 1,0 – 2,5 мкм без охолодження (рис. 2).

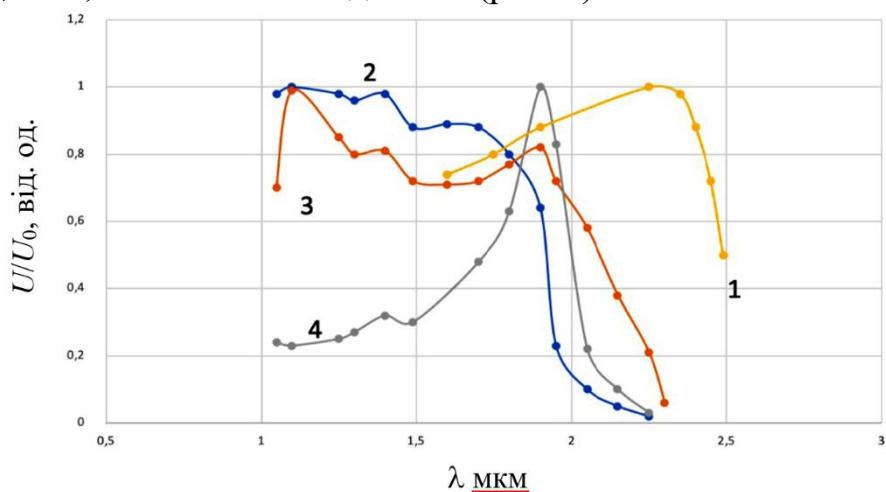


Рис. 2. Спектральна фоточутливість після ЛО: 1 – епітаксійна (РЕ) гетероструктура $\text{In}_4\text{Se}_3\text{-In}_4\text{Te}_3$; 2 – проплавлений лазером шар на кристалі n-In₄Se₃ при $E = 8 \text{ Дж/см}^2$; 3 – проплавлений лазером шар при $E = 12 \text{ Дж/см}^2$; 4 – при освітленні зразка (3) зі сторони підкладки.

Створення таких фоточутливих елементів може бути перспективним для застосування в телекомунікаційних системах, для біологічних та медичних областей.

- [1] Хархаліс Л.Ю., Глухов К.Є., Бабука Т.Я. Електронна структура та оптичні властивості гетероструктур на основі кристалів In_4Se_3 і In_4Te_3 // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія “Фізика”, Вип. 40. – 2016 . – С.80-91.

The influence of Mn and Sn ions on critical temperatures T_C and T_g in semimagnetic semiconductors $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Mn}_y\text{Te}$

V. E. Slynko¹, L. Kilanski², V. V. Netyaga¹, S. P. Yurtsenyuk¹, A. V. Zaslonkin

¹Chernivtsi Branch of Frantsevych Institute for Problems of Materials Science, NASU,

Iryny Vilde 5, Chernivtsi, 58001, Ukraine

²Institute of Physics, Polish Academy of Sciences,

Aleja Lotników 32/46, PL-02668 Warsaw, Poland

Development of new functional materials for spin electronics requires fundamental research of their magnetic properties [1]. We have synthesized semimagnetic semiconductor $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Mn}_y\text{Te}$, the diamagnetic matrix of which (GeTe) contains magnetic (Mn) and nonmagnetic (Sn) impurity ions. Single crystals of $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ ($0.16 \leq x \leq 0.84$; $0.003 \leq y \leq 0.086$) were grown by the modified vertical Bridgman method from chemically pure elemental components, including vacuum-distilled Mn and Te. To improve the solubility of Mn (m. p. 1244 °C) in the crystal matrix, the compound MnTe_2 with a significantly lower melting point (741 °C) was pre-synthesized and used for crystal growth. As-grown cylindrical ingots were completely cut into ~1.5 mm thick discs, from which smaller samples were prepared for detailed structural, galvanomagnetic and magnetic measurements.

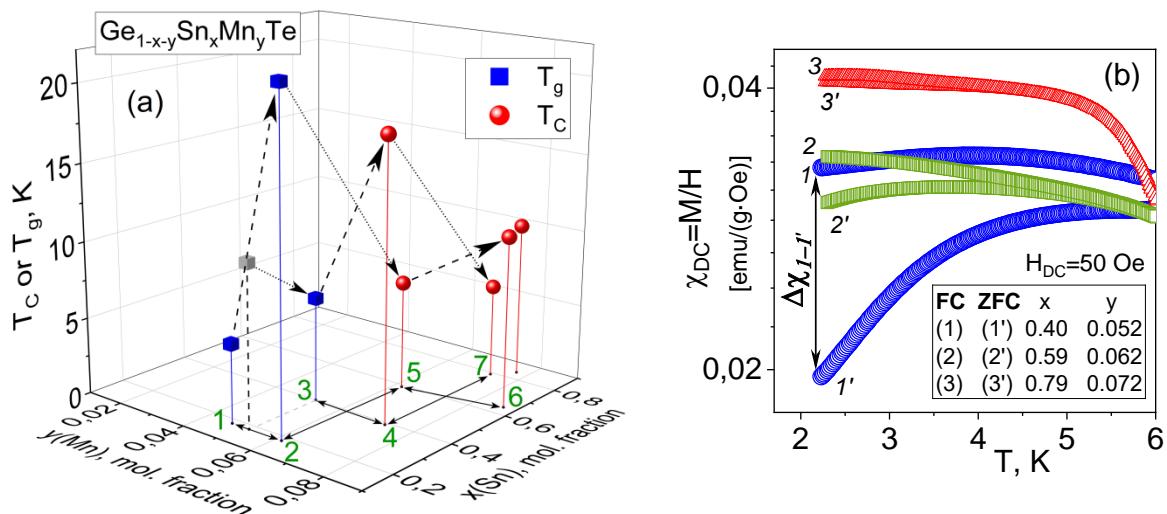


Fig. 1 – a) 3D magnetic phase diagram of the $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ (fragment); b) dependence of FC/ZFC bifurcation on x, y content (field/zero field cooling)

High-resolution X-ray diffractometry confirmed single-phase nature of the samples. Based on the results of magnetic measurements, 3D magnetic phase diagram of the $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ was constructed (Fig. 1a). It allowed to reveal a simple and monotonous dependence of the *Curie temperature* (T_C) and *initial temperature* (T_g) of the phase transition to spin (SG) or cluster glass (CG) on the content of Mn and Sn. Increasing the Mn content increases

both critical temperatures T_C and T_g (pairs: 1-2, 3-4, 5-6 on Fig. 1a), whereas increasing the Sn content decreases them (pairs: 2-5, 4-7 on Fig. 1a).

A specific feature of spin and cluster glasses is the bifurcation of the temperature dependences of magnetization $M(T)$ or static susceptibility $\chi_{DC}(T)=M(T)/H_{DC}$ (Fig. 1b). Curves 1-3 were measured after cooling the samples in a non-zero magnetic field (FC mode, field cooling). Curves 1'-3' were measured after cooling the samples in zero magnetic field (ZFC mode, zero field cooling). The greater the divergence between the $\chi_{DC}(T)$ curves after the bifurcation point, the closer the magnetic system to spin (SG) or cluster glass (CG). The smaller the divergence, the greater the predominance of the ferromagnetic phase (FM). This means that the mouth-like $\Delta\chi_{DC}$ value (Fig. 1b) can be a quantitative measure of the ratio between the ordered ferromagnetic phase (FM) and magnetically disordered spin (SG) or cluster glass (CG) in semimagnetic semiconductors.

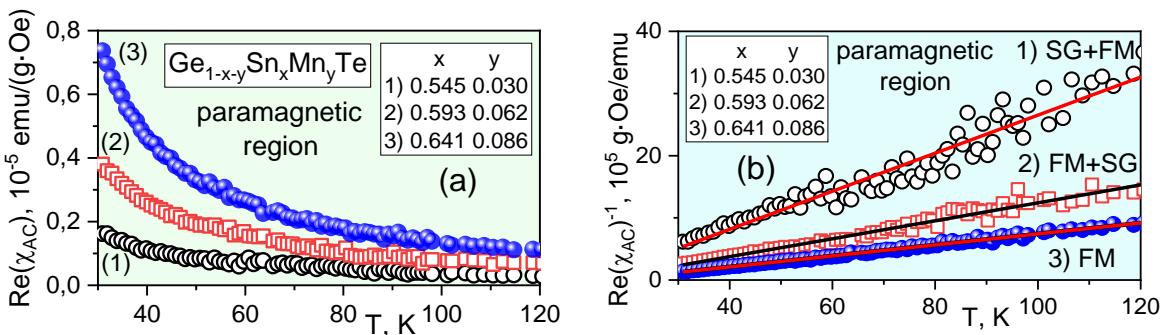


Fig. 2 – a) Dynamic magnetic susceptibility of $Ge_{1-x-y}Sn_xMnyTe$ samples in the paramagnetic region ($T > \Theta$); b) estimation of the magnetic order/disorder relationship from the scatter of points around linear Curie-Weiss fits

Another convenient measure of magnetic order and disorder is the dispersion of experimental points around linear fits of the $Re(\chi_{AC})^{-1}(T)$ dependences by the Curie-Weiss law. The more accurately the points lie on a straight line (Fig. 2b, point set No. 3), the closer the magnetic system will be to the ferromagnetic phase after cooling below the *Curie-Weiss temperature* (Θ). And vice versa, the greater the spread of points (point set No. 1), the closer the system will be to spin or cluster glass at temperatures $T < \Theta$.

The content of magnetoactive Mn ions y_Θ is from 36 to 75% of their total content in the $Ge_{1-x-y}Sn_xMnyTe$ samples ($x \approx 0.18$, $y = 0.027 \div 0.061$). This means that not all Mn ions are located in the cation sublattice sites in the charge state 2+, which was used when calculating y_Θ . The second reason for such a value of y_Θ is the fluctuation of the magnetic impurity content, due to which only a part of the Mn ions and their clusters are located close enough for the RKKY (Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida) exchange interaction.

[1] Guo, Y., Zhang, X., Huang, Z. et al. Quantum materials for spintronic applications // npj Spintronics 2, 36 (2024). <https://doi.org/10.1038/s44306-024-00038-z>

Investigation of electro-physical properties of Cr/p-Hg_{0.72}Cd_{0.28}Te and Cr/p-CdTe/Hg_{0.72}Cd_{0.28}Te contacts

V. Slipokurov¹, A. Zinovchuk², F. Sizov¹, Z. Tsybrii¹, Ye. Melezhyk¹, Ye. Storozhuk¹

¹ V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 41 Nauky Avenue, Kiev 03680, Ukraine

² Zhytomyr Ivan Franko State University, 40 Velyka Berdychivska Str., Zhytomyr 10008, Ukraine

The design of MCT IR detectors involves a number of challenges, one of which is the decomposition of the MCT material in the surface layer, making it undesirable to perform technological processes or store the devices at relatively high temperatures ($T > 100$ °C). It should be taken into account also the fragility of the material, the possible mutual diffusion of metals deposited on the HgCdTe surface when making contacts, etc. [1].

CdTe films on the surface of Hg_{0.72}Cd_{0.28}Te monocrystalline epitaxial layers, grown by Liquid Phase Epitaxy (LPE) method on the CdZnTe (111) substrates, were formed using the Hot Wall Epitaxial (HWE) method, which is one of the variations of the thermal gaseous vacuum sputtering. CdTe films ($d \approx 400$ nm) grown under the low-temperature conditions ($T \leq 100$ °C) by the HWE technique, have been chosen as protective coatings to the MCT surface.

Two types of contacts, which can be used for designing of IR detectors for 3 to 5 μm spectral range: Cr/p–CdTe/p–Hg_{0.72}Cd_{0.28}Te and Cr/p–Hg_{0.72}Cd_{0.28}Te, were formed by the magnetron sputtering. For the "Linear Transmission Line Model" (LTLM) method, a structure topology with selected areas for contact metallization was chosen for subsequent measurements of electrophysical characteristics (Fig. 1).

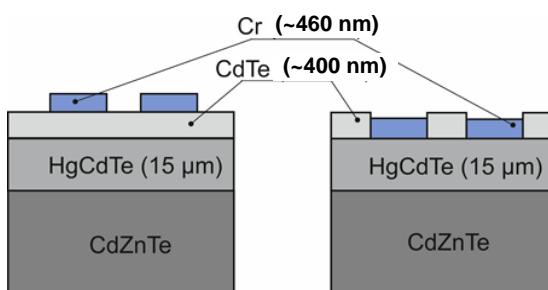


Fig.1. The schematic cross-section of fabricated structures Cr/p–CdTe/p–Hg_{0.72}Cd_{0.28}Te/CdZnTe and Cr/p–Hg_{0.72}Cd_{0.28}Te/CdZnTe.

Several sets of test structures with the dimensions of the contact pads of $L=40$ μm (length) and $W=2060$ μm (width) were used. The scheme of structure for LTLM method with the following values of the gap between Cr

contacts in microns: $L_1=400$ μm , $L_2=600$ μm , $L_3=800$ μm , $L_4=1200$ μm , $L_5=1600$ μm , $L_6=2400$ μm . Measured I–V characteristics in both samples are presented in fig.2.

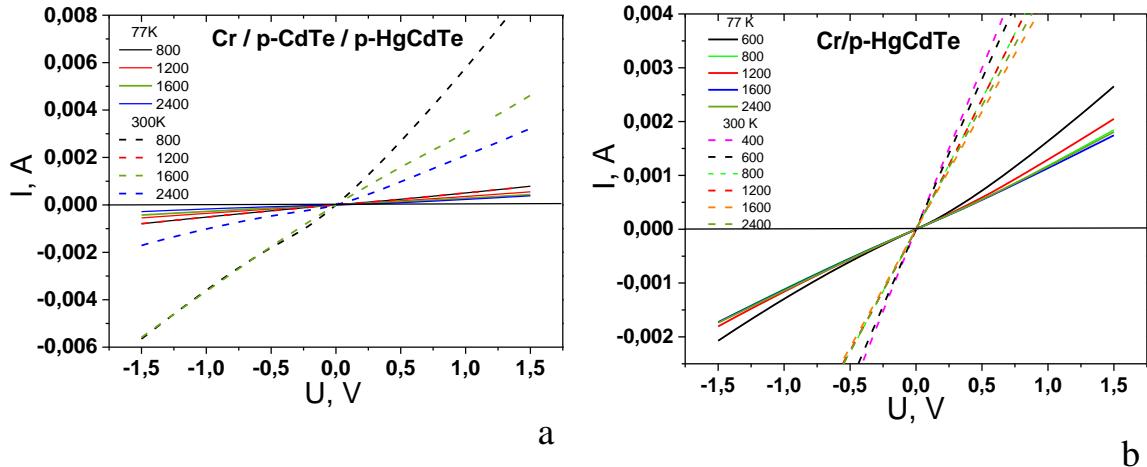


Fig.2. Current-voltage characteristics of contacts for Cr/p-CdTe/p-Hg_{0.28}Cd_{0.72}Te (a) and Cr/p-Hg_{0.28}Cd_{0.72}Te (b) samples, respectively, at temperatures of 77K and 300K.

The insets show distances in microns between adjacent pairs of contact lines.

This work shows that it was possible to form interfaces Cr/p-CdTe/p-Hg_{0.28}Cd_{0.72}Te and Cr/p-Hg_{0.28}Cd_{0.72}Te with Ohmic properties, which remain stable at temperatures T≈80 and 300 K. Values of specific contact resistance ρ_c for Cr/p-CdTe/p-Hg_{0.28}Cd_{0.72}Te are $\rho_c(300\text{K})=(0.03\div0.28)$ $\Omega\cdot\text{cm}^2$ and $\rho_c(77\text{K})=(0.30\div0.34)$ $\Omega\cdot\text{cm}^2$ and for Cr/p-Hg_{0.28}Cd_{0.72}Te are $\rho_c(300\text{K})=(0.02\div0.11)$ $\Omega\cdot\text{cm}^2$ and $\rho_c(77\text{K})=(0.15\div0.22)$ $\Omega\cdot\text{cm}^2$, respectively. The mechanism of current transport through the Cr/p–CdTe/p–Hg_{0.72}Cd_{0.28}Te and Cr/p–Hg_{0.72}Cd_{0.28}Te interfaces was explained with using the MIGS (metal-induced gap states) model in the semiconductor. Accounting of the relatively large series resistance of bulk semiconductor films and large area resistance of Schottky barriers, explain the linear or almost linear I–V characteristics in the LTLM configuration for these structures.

1. Rogalski, A. Next decade in infrared detectors, Proc. SPIE., 10433, 104330L–22 (2017).

Thickness-driven optical transformations in GeTe and Sb₂Te₃ ultra-thin films

K. Shportko¹, S. Cremer², A. Lotnyk², I. Maricheva¹, V. Gorokhov³

¹V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of NAS of Ukraine, Nauki av. 41, Kyiv 03028, Ukraine, k.shportko@ukr.net;

²Leibniz Institute of Surface Engineering, Permoser str. 15, 04318 Leipzig, Germany

³V.I. Bakul Institute of Superhard Materials of NAS of Ukraine, Avtozavodska str. 2, Kyiv 04074, Ukraine

Phase-change materials, a distinctive subclass of chalcogenides, have attracted significant research interest due to their exceptional properties and diverse applications, particularly in memory storage and photonics [1], [2], [3]. Among these, germanium-antimony-tellurium (Ge-Sb-Te) alloys, originating from the GeTe- Sb₂Te₃ pseudo-binary line, have become a key focus in the field. While the properties of Ge-Sb-Te alloys have been extensively investigated [4], [5], notable discrepancies between thin films and bulk materials emphasize the need for specialized studies targeting thin-film behavior [6].

This research specifically examines the terminal compounds of the GeTe-Sb₂Te₃ pseudo-binary line to explore their structural and optical characteristics in thin-film form. This study investigates the influence of film thickness on the properties of GeTe and Sb₂Te₃ thin films, providing insights into the relationship between material dimensions and performance.

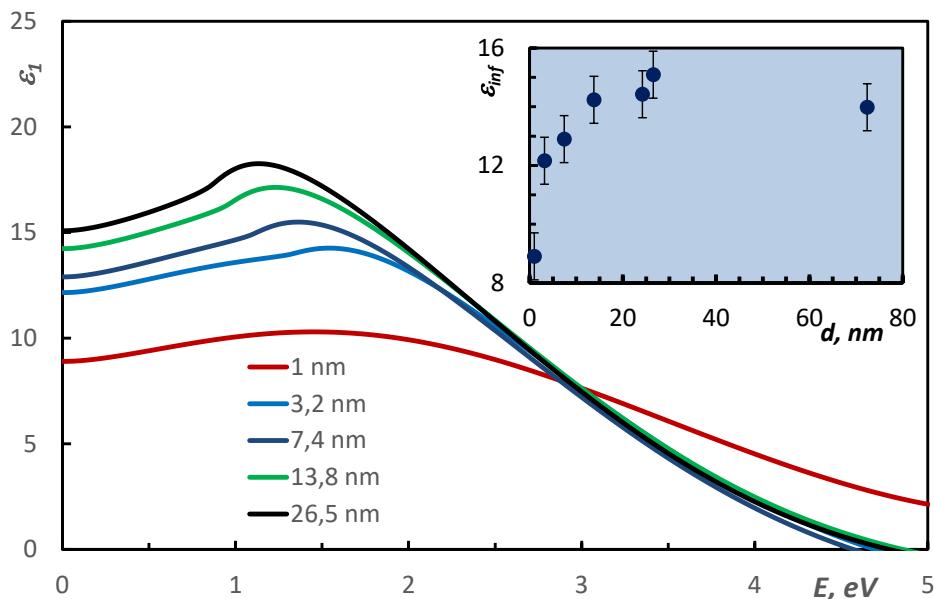


Figure 1. Real part of the dielectric function of GeTe thin films of various thicknesses. Inset: thickness dependence of the high-frequency dielectric constant ϵ_{inf} of GeTe thin films.

The optical properties of GeTe films (Figure 1), including the dielectric constant, Urbach energy, and bandgap energy, exhibit notable thickness-dependent behaviors across two distinct ranges. In the 1–20 nm interval, quantum confinement plays a dominant role, resulting in pronounced variations in these parameters. Beyond this range, from 20–72 nm, the influence of quantum confinement diminishes, leading the optical properties to approach bulk-like values, with minor deviations attributed to structural disorder.

Similarly, this study sheds light on the thickness-dependent evolution of optical and structural properties in Sb_2Te_3 thin films spanning thicknesses from 3 nm to 148 nm. Systematic analyses reveal distinct scaling effects across four defined thickness regimes, each characterized by unique transitions in quantum confinement, crystallization, changing of the bonding mechanism, and disorder.

These findings provide a comprehensive understanding of the thickness-dependent optical properties of GeTe and Sb_2Te_3 films paving the way for advancements in various applications of these materials.

- [1] M. Wuttig, H. Bhaskaran, and T. Taubner, “Phase-change materials for non-volatile photonic applications,” *Nat Photonics*, vol. 11, no. 8, pp. 465–476, Aug. 2017, doi: 10.1038/nphoton.2017.126.
- [2] M. Wuttig and N. Yamada, “Phase-change materials for rewriteable data storage,” *Nat Mater*, vol. 6, no. 11, pp. 824–832, Nov. 2007, doi: 10.1038/nmat2009.
- [3] A. Lotnyk, M. Behrens, and B. Rauschenbach, “Phase change thin films for non-volatile memory applications,” *Nanoscale Adv*, 2019, doi: 10.1039/C9NA00366E.
- [4] K. Shportko, S. Kremers, M. Woda, D. Lencer, J. Robertson, and M. Wuttig, “Resonant bonding in crystalline phase-change materials,” *Nat Mater*, vol. 7, no. 8, pp. 653–658, Aug. 2008, doi: 10.1038/nmat2226.
- [5] K. V. Shportko, “Disorder and compositional dependences in Urbach-Martienssen tails in amorphous $(\text{GeTe})_x(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{1-x}$ alloys,” *Sci Rep*, vol. 9, no. 1, pp. 6030.1–6030.9, Dec. 2019, doi: 10.1038/s41598-019-42634-8.
- [6] I. Ronneberger, Z. Zanolli, M. Wuttig, and R. Mazzarello, “Changes of Structure and Bonding with Thickness in Chalcogenide Thin Films,” *Advanced Materials*, vol. 32, no. 29, Jul. 2020, doi: 10.1002/adma.202001033.

Molecular dynamics simulation study of elastic characteristics of 3C-SiC modified with extended defects

Serhii Shmahlii¹ and Andrey Sarikov^{1,2,3}

¹*V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 41 Nauky Avenue, 03028 Kyiv, Ukraine*

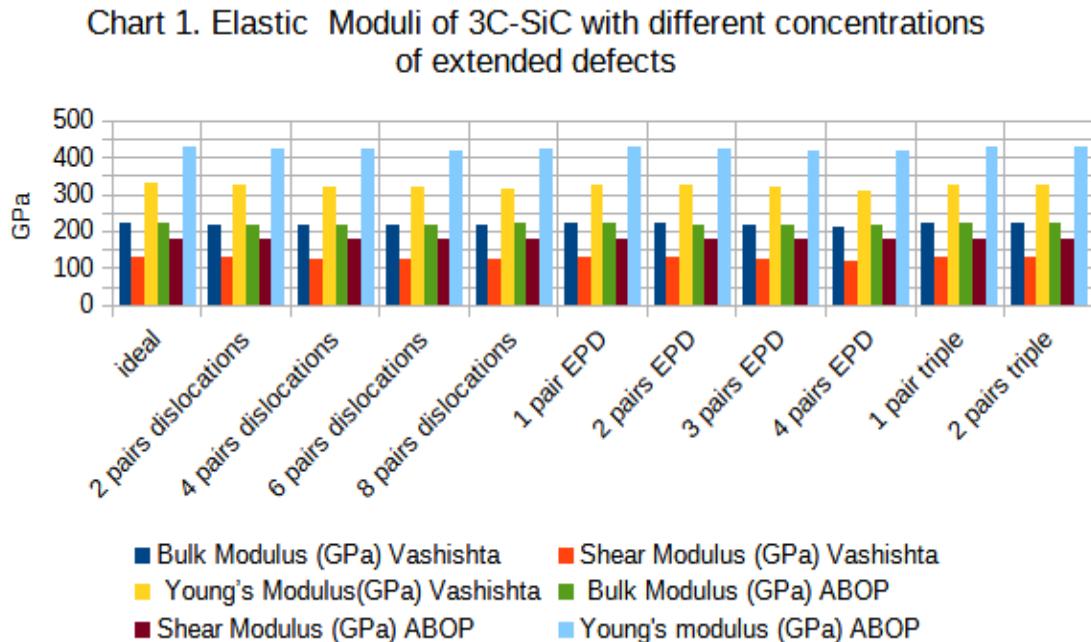
²*Educational Scientific Institute of High Technologies, Taras Shevchenko National University of Kyiv, 4-g Hlushkova Avenue, 03022 Kyiv, Ukraine*

³*National Technical University of Ukraine “Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”, 37 Beresteiskyi Avenue, 03056 Kyiv, Ukraine*

Cubic silicon carbide (3C-SiC) is a wide band gap semiconductor material with appealing characteristics for many applications varying from power electronics and wear-resistant mechanical components to harsh environments electronics and micro-electromechanical systems. The available industrial technologies to produce 3C-SiC films introduce into the material a large number of extended defects such as dislocations, dislocation complexes, and stacking faults, which can impact its mechanical, electrical, optical, and thermal properties.

The goal of our research is to investigate the influence of different types and concentrations of extended defects on the elastic properties of 3C-SiC material. On the one hand, this knowledge is relevant for reliable control and operation of 3C-SiC based device components. On the other hand, such information is scarcely available in scientific literature. We used molecular dynamics simulations with Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) software. 3C-SiC simulation cells were prepared using a visualization and analysis tool OVITO extended with Python script capability. A ca. $171 \times 9 \times 181$ Å³ 3C-SiC ideal cell containing 27648 atoms as well as the cells with 2, 4, 6 and 8 dipoles made by 90° and 30° pairs of Shockley partial dislocations separated by stacking faults, with 1, 2, 3 and 4 extrinsic partial dislocation dipoles, and with 1 and 2 triple dislocation complex dipoles [1] were prepared. Periodic boundary conditions were applied to all the simulation cells in all three dimensions to mimic the bulk 3C-SiC material behavior. The simulation cells were undergone finite volume deformations to compute elastic constants tensors, applying a script included in the LAMMPS installation package. The simulations were carried out for two potentials describing the Si and C atom interaction, namely Vashishta and analytic bond-order (ABOP) ones, having provided the best description ability of extended defects behavior in 3C-SiC [2]. The Hill average Young’s modulus, bulk and shear moduli, and Poisson ratio were calculated from the aforementioned elastic constants

data. The values of these characteristics are visualized and compared by the chart below.



As can be seen from the chart, the simulation results demonstrate that an increase in the concentration of each type of extended defects considered here tends to steadily reduce the values of the Young's, bulk, and shear moduli calculated with the Vashishta potential. At this, such reduction is moderate and does not exceed about 5% for the maximal defect concentrations as compared to the respective values for the ideal cell. The simulations with the ABOP potential show overall a similar tendency except for the maximal defect concentrations, at which the elastic moduli values somewhat go up. This may be caused by higher sensitivity of the analytic bond-order potential to local effects such as strengthening interactions between densely periodically packed defects. In both potential cases, the changes to the Poisson ratio is less than 1%.

- [1] Serhii Shmahlii and Andrey Sarikov, Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics, 27 (4), 389-396 (2024).
- [2] Andrey Sarikov, Anna Marzegalli, Luca Barbian, Emilio Scalise, Francesco Montalenti, and Leo Miglio, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 28(1), 015002 (2019).

Microhardness investigation of the monocrystalline $\text{Ag}_{7+x}(\text{P}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_6$ solid solutions

I. Shender¹, Y. Stasiuk¹, A. Pogodin¹, M. Filep², T. Malakhovska¹, V. Bilanych¹

¹Uzhhorod National University, Pidgirna St. 46, Uzhhorod 88000, Ukraine

²Ferenc Rákóczi II Transcarpathian Hungarian College of Higher Education, Kossuth Sq.

6, Beregovo 90200, Ukraine

E-mail: iryna.shender@uzhnu.edu.ua

The superionic conductors Ag_7PS_6 and Ag_8GeS_6 belong to compounds with an argyrodite structure and exhibit several advantages that make them significant in the fields of materials science, technology, and industry [1,2]. Microhardness measurements provide information about a material's resistance to deformation, which is particularly crucial when selecting materials for high-performance devices such as sensors, microelectronic components, and so on [3]. Crystal growth of initial compounds Ag_7PS_6 , Ag_8GeS_6 and solid solutions $\text{Ag}_{7+x}(\text{P}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_6$ ($x = 0.1; 0.25; 0.33; 0.5; 0.75$) were performed by directional crystallization from the melt. In the case of solid solutions, the melt-solution technique was applied, which is attributed to the nature of the physicochemical interactions in the Ag_7PS_6 - Ag_8GeS_6 system. Microhardness studies were performed on polished, plane-parallel monocrystalline samples of solid solutions of the Ag_7PS_6 - Ag_8GeS_6 system ($x = 0; 0.1; 0.25; 0.33; 0.5; 0.75; 1$) at room temperature using a PMT-3 microhardness tester. The dwell time for each load on the indenter was 10 seconds, and at each load, at least 5 indentations were performed. Microhardness was investigated over a load range on the indenter from 0.05 to 2 N. The Vickers microhardness (H) as a function of the load was evaluated using the well-known relation:

$$H = \frac{2P \sin \alpha / 2}{d^2} = 1.854 \frac{P}{d^2} \quad (1)$$

where P is the load applied to the indenter, d is the diagonal of the indentation, and α is the angle of the indenter's apex.

For all the investigated samples, a decrease in the microhardness values (H) with increasing load (P) is observed, indicating the presence of a normal size effect. A further analysis of the microhardness of the $\text{Ag}_{7+x}(\text{P}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_6$ ($x = 0; 0.1; 0.25; 0.33; 0.5; 0.75; 1$) solid solutions was performed using the Meyer's law, which is used to estimate the normal size effect. The mathematical expression of the Meyer's law is as follows:

$$P = A \cdot d^n \quad (2)$$

and its linear form is:

$$\log P = \log A + n \cdot \log d \quad (3)$$

where P is the applied load on the indenter, d is the diagonal length of the indenter's imprint, A is a constant that characterizes the material's resistance to the indenter's influence, and n is the Meyer index.

In the case of $n = 2$, the microhardness is independent of the applied load on the indenter, while values of $n \leq 2$ indicate the presence of a tendency toward a normal size effect, meaning a decrease in microhardness with an increase in the applied load. The value of n is determined from the slope of the resulting curve (Fig. 1).

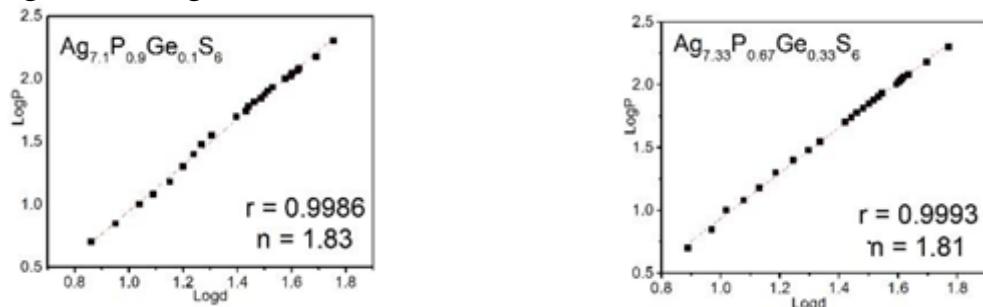


Fig. 1. The dependence of the logarithm of the applied load (P) on the logarithm of the diagonal length of the indenter's imprint (d) according to the Meyer's law for $\text{Ag}_{7+x}(\text{P}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_6$ ($x=0.1; 0.33$) crystals

The microhardness of the monocrystalline samples is also described within the framework of the proportional specimen resistance (PSR) model, the results of which also indicate the presence of a normal size effect. The calculated values of the intrinsic hardness (H_0) for the solid solutions $\text{Ag}_{7+x}(\text{P}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_6$ within the PSR model are as follows: 903.1 N/mm² ($x=0$), 997.7 N/mm² ($x=0.1$), 990.2 N/mm² ($x=0.25$), 1019.9 N/mm² ($x=0.33$), 1053.3 N/mm² ($x=0.5$), 1097.8 N/mm² ($x=0.75$), 1081.1 N/mm² ($x=1$). For the studied solid solutions, the values of the Meyer index n range from 1.72 to 1.86 (indicating that these solid solutions belong to soft materials). It has been established that an increase in the Ge content in the studied samples leads to an increase in the microhardness of the materials.

- [1] Laqibi M., Cros B., Peytavin S., Ribes M. New silver superionic conductors $\text{Ag}_7\text{XY}_5\text{Z}$ ($X = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$; $Y = \text{S}, \text{Se}$; $Z = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$)-synthesis and electrical studies. *Solid State Ionics*. 1987. **23**. P. 21–26. [https://doi.org/10.1016/0167-2738\(87\)90077-4](https://doi.org/10.1016/0167-2738(87)90077-4).
- [2] Ohno S., Banik A., Dewald G.F. *et al.* Materials design of ionic conductors for solid state batteries. *Prog. Energy*. 2020. **2**. P. 022001. <https://doi.org/10.1088/2516-1083/ab73dd>.
- [3] Zong Z., Lou J., Adewoye O.O., Elmustafa A.A., Hammad F., Soboyejo W.O. Indentation size effects in the nano and microhardness of FCC single crystal metals. *Materials and Manufacturing Processes*, 2007, **22**, 228–237. Doi: 10.1080/10426910601063410.

Дослідження оптичних спектрів кристала BaTeMo₂O₉ з домішкою іонів Cr³⁺

М.Я. Рудиш¹, А.І. Кашуба², І. В. Семків², В.М. Кордан¹, М. Пясецький³, Р.Б. Матвій¹

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія 8,
79000, Львів, Україна

²Національний Університет "Львівська Політехніка", вул. Степана Бандери 12,
Львів, Україна

³Університет імені Яна Длугоша в Ченстохові, ал. Армії Крайової 13/15,
Ченстохова, 42-201, Польща

Кристал BaTeMo₂O₉ є перспективним функціональним матеріалом для використання в оптоелектроніці, пристроях для керування оптичним сигналом. Завдяки їхнім унікальним фізико-хімічним та симетрійним властивостям, зокрема відсутності центра симетрії, вони є цікавими з точки зору використання в нелінійній оптиці [1-2]. Цей матеріал демонструє значні п'єзоелектричні властивості, що робить його перспективним для п'єзоелектричних застосувань. Зокрема, визначені резонансною методикою та аналізом імпедансу п'єзоелектричний коефіцієнт d_{34} становить 30,25 пКл/Н, а коефіцієнт пружної податливості $S_{44} = 36,46 \text{ пм}^2/\text{Н}$. Ці характеристики свідчать про високу ефективність кристала в перетворенні механічної енергії в електричну [3]. Вимірюна методом Z-скану у роботі [4] нелінійна зміна показника заломлення виявилася рівною приблизно $n_2 \approx 5,5 \cdot 10^{-5}$. Оцінене значення коефіцієнта двофotonного поглинання для довжини хвилі $\lambda = 532 \text{ нм}$ становить $\beta = 0,34 \text{ см}/\text{ГВт}$, що є оптимальним для можливого застосування в різних оптоелектронних пристроях і видається перспективним порівняно з іншими молібдатами [4].

Ефективним методом тюнінгу властивостей матеріалів є впровадження в їхню структуру легуючих елементів. Додавання домішок різного типу можуть суттєво впливати та механічні, електричні та, в першу чергу, оптичні характеристики матеріалу. З огляду на це, з'ясування впливу впровадження домішок на властивості кристала BaTeMo₂O₉ є цікавим та актуальним.

Однією із ключових характеристик, що визначають оптичну поведінку, є спектр поглинання в області фундаментального поглинання. Метою даної роботи є дослідити спектральні характеристики поглинання кристала BaTeMo₂O₉ з домішкою Cr³⁺ і визначити значення його забороненої зони та положення рівня домішки Cr³⁺.

Кристали вирощували у низькотемпературній β -фазі методом вирощування з розчину за допомогою затравки. Структура кристала перевірялась EDX та EDS методами за допомогою Tescan Vega 3 LMU скануючого електронного мікроскопа зі системою Oxford Instruments AZtec ONE. З використанням оптоволоконного спектрофотометра AvaSpec-ULS2048-UA-50 (Avantes) досліджено оптичні спектри

пропускання $T(\lambda)$ монокристалу в діапазоні довжин хвиль від 450 до 850 нм з кроком 0.5 нм за кімнатної температури. Генератором оптичного випромінювання слугувала імпульсна ксенонова лампа.

На рис. 1 представлено експериментально виміряні спектри оптичного пропускання монокристалу при кімнатній температурі. В спектра пропускання спостерігається один широкий пік ~ 575 nm, який пов'язаний із присутністю домішки Cr^{3+} в зразку [5]. Він пов'язаний з електронним переходом, що здійснюється з основного стану ${}^4\text{A}_{2g}$ на ${}^4\text{T}_{2g}$ (${}^4\text{A}_{2g} \rightarrow {}^4\text{T}_{2g}$) [5]. На основі даного переходу було визначено параметр кристалічного поля $10Dq$, який становить ~ 17390 cm $^{-1}$.

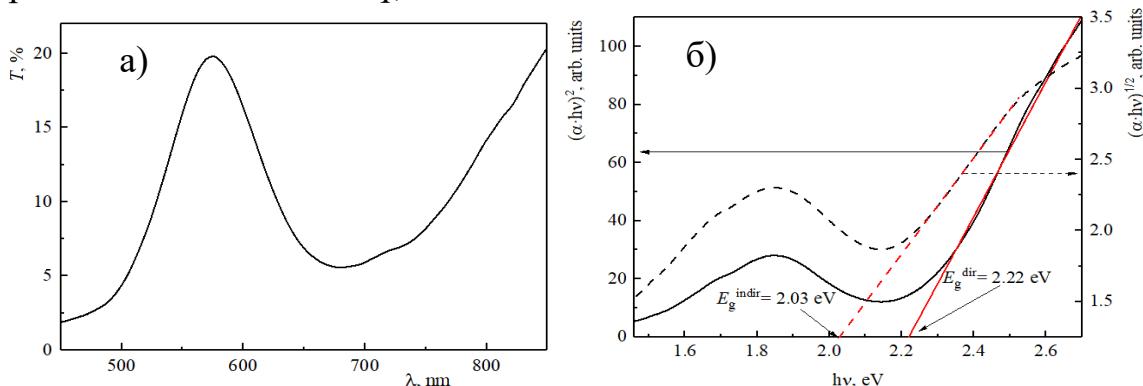


Рис. 1. Спектр пропускання (а), його похідна $dT/d\lambda$ (б) та коефіцієнт поглинання монокристалу в координатах Тауца (в) за кімнатної температури.

Для визначення оптичної ширини забороненої зони і характеру енергетичного переходу монокристалу використано координати Тауца. Побудувавши залежності $(\alpha \cdot h\nu)^2$ від $h\nu$ (для визначення E_g^{dir}) та $(\alpha \cdot h\nu)^{1/2}$ від $h\nu$ (для визначення E_g^{indir}) отримано величину оптичної ширини забороненої зони, що E_g^{dir} становить 2,22 eВ, а E_g^{indir} – 2,03 eВ. З експериментально досліджених спектрів пропускання, також було встановлено інтегральну величину пропускання, становить 10,27 %.

1. W. Zhang, X. Tao, C. Zhang, H. Zhang, M. Jiang. *Structure and Thermal Properties of the Nonlinear Optical Crystal BaTeMo₂O₉*. Cryst. Growth Des. 2009. 9, 6, P.2633–2636.
2. W. Zhang, X. Tao, C. Zhang, Z. Gao, Y. Zhang, W. Yu, X. Cheng, X. Liu, M. Jiang. *Bulk Growth and Characterization of a Novel Nonlinear Optical Crystal BaTeMo₂O₉*. Crystal Growth & Design, 2008. 8, No. 1, 304-307.
3. Z. Gao, X. Tao, X. Yin, W. Zhang, M. Jiang. *Elastic, dielectric, and piezoelectric properties of BaTeMo₂O₉ single crystal*. Applied Physics Letters, 2008. 93(25), P. 252906-252906-3.
4. I. Fuks-Janczarek, R. Miedzinski, M.G. Brik, A. Majchrowski, L.R. Jaroszewicz, I.V. Kityk. *Z-scan analysis and ab initio studies of β-BaTeMo₂O₉ single crystal* // Solid State Sciences. 2014. 27, P. 30-35.
5. Radostin S. Pavlov, Vicente B. Marza and Juan B. Carda. *Electronic absorption spectroscopy and colour of chromium-doped Solids*. J. Mater. Chem. 2002, 12, P. 2825–2832.

Electrophysical properties of polymer films with CdCu nanocrystals

O.V. Pylypova¹, A.A. Evtukh^{1,2}, A.I. Pylypov¹, D. Korbutyak², V. Tokarev³

¹Educational and Scientific Institute of High Technologies, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Volodymyrska Street, 64, Kyiv 01601, Ukraine

²V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 41 Pr. Nauky, Kyiv 03028, Ukraine.

³Lviv Polytechnic National University, 79013, Lviv, Ukraine

Electrical response, lightweight and high energy density of electroactive polymers with colloidal nanocrystals (NCs) have potential applications in optoelectronics, photovoltaics, biology and medicine. The organic polymer matrix can stabilize nanoparticles in the solid, and the resulting nanocomposites can combine the advantages of the properties of organic and inorganic components, such as the mechanical properties of polymers and the optical and electrical properties of nanocrystals.

The goal of this work is to investigate the current-voltage characteristics of polymer-based composite films containing $\text{Cd}_{1-x}\text{Cu}_x\text{S}$ nanocrystals to determine their prospects for organic electronics and optoelectronics. The nanocomposite polymer films with embedded semiconductor $\text{Cd}_{1-x}\text{Cu}_x\text{S}$ nanoclusters (NCs) were prepared by using the solution of the peroxide reactive copolymer (PRC), polyethylene glycol (PEG-200) and the mixture of cadmium acetate (CdAc_2) with copper acetate (CuAc_2) in dimethylformamide were prepared at different ratios of $\text{Cd}(\text{Ac})_2 : \text{Cu}(\text{Ac})_2$. Due to dissociation of $\text{Cd}(\text{Ac})_2$ and $\text{Cu}(\text{Ac})_2$ in the solution the Cd^{2+} and Cu^{2+} ions, which are bounded with polymer matrix, are formed. After that, the thin polymer films containing Cd^{2+} and / or Cu^{2+} cations were deposited by spinning coatings on glass plates. In the second stage, these films were annealed and crosslinked at $T = 393$ K for 2 hours. It was found that the high degree of crosslinking of the polymer films was achieved due to: i) the interaction of hydroxyl groups of PEG-200 with anhydrous functional substances of the PRC and ii) the sequence of radical reactions involving the disintegration of the PRC peroxide functionals.

The current-voltage characteristics of the films with different ratios of Cd and Cu in $\text{Cd}_{1-x}\text{Cu}_x\text{S}$ nanocrystals embedded into a polymer matrix and deposited on glass substrates were measured without and with light illumination by using the picoampermeter Keithley 2410 in two-contact probe configuration. The solar light simulator based on halogen lamps with the light intensity of 100 mW/cm^2 has been used for sample illumination. Light and dark $J - E$ characteristics of polymer films with embedded $\text{Cd}_{1-x}\text{Cu}_x\text{S}$ nanocrystals in $\log J - E$ coordinates depending on Cu concentration are presented in Fig. 1. The dependence of the current density on the applied field

is similar to poly(3-hexylthiophene) (P_3HT) polymer films with CdS nanocrystals

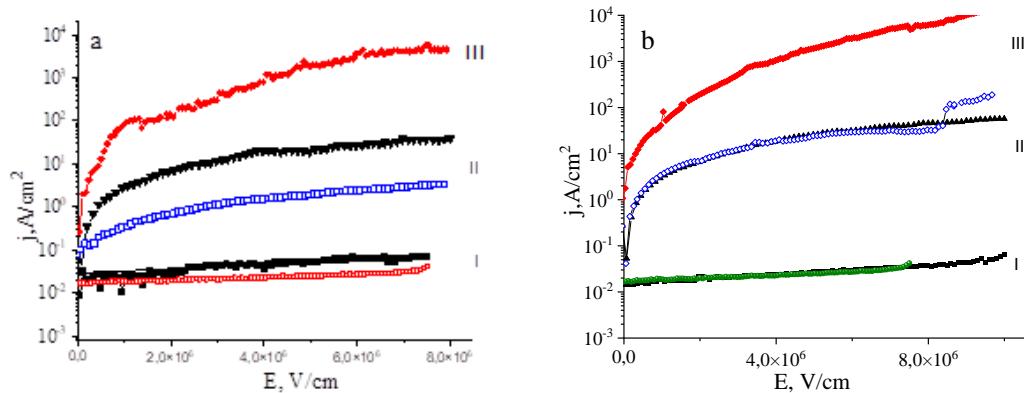


Fig. 1. J - E characteristics $Cd_{1-x}Cu_xS$: I – $x = 0$ and $x = 0.25$, II – $x = 0.50$ and $x = 0.7$, III – $x = 1$ a) dark, b) light illumination.

As can be seen, the current through growth with increasing the Cu in $Cd_{1-x}Cu_xS$ nanocrystals. We will analyze the current transport mechanism for three types of $Cd_{1-x}Cu_xS$ nanocrystals: I – $x = 0$ and $x = 0.25$, II – $x = 0.40$ and $x = 0.6$, III – $x = 1$ (Fig. 1a, 1b). The conductivity between each type differs by 2 orders of the magnitude. In case of PRC- $Cd_{1-x}Cu_xS$ composite polymer film with 40-60 % of Cu in $Cd_{1-x}Cu_xS$ nanocrystals the carrier transport according to Ohmic law dominates within the investigated voltage range at measurement both without and with light. It is possible to estimate the free carrier concentrations in case if we postulate the carrier mobility in polymers at the level of $\mu = 1.5 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ calculated from the model of TL SCLC and it is in agreement with the one obtained in [1].

In case of PRC- CuS composite polymer film with CuS nanocrystals the current - voltage characteristics are straightened in $\log (I/U)$ - $U^{1/2}$ coordinates. This points out on the conductivity according to the Poole-Frenkel mechanism.

The obtained barrier heights for composite polymer film with CuS nanocrystals are $\varphi_B \approx 0.42 \text{ eV}$ (under light) and $\varphi_B \approx 0.44 \text{ eV}$ (dark). These barriers are between the trapping centers and LUMO band in the PRC- CuS composite polymer film.

1. Zheng, Y. Q., Lei, T., Dou, J. H., Xia, X., Wang, J. Y., Liu, C. J., & Pei, J. Strong electron-deficient polymers lead to high electron mobility in air and their morphology-dependent transport behaviors. *Adv. Mater.* 28, 7213-7219 (2016).

The dielectric losses in MIS structures with $\text{SiO}_x\&\text{Fe}_y\text{O}_z(\text{Fe})$ films

Pylypov A.I.¹, A.A. Evtukh^{1,2}, S.V. Antonin², Pylypova O.V.¹, Muryi Ya.Yu.²,
O.L. Bratus²

¹*Educational and Scientific Institute of High Technologies, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Volodymyrska Street, 64, Kyiv 01601, Ukraine*

²*V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 41 Pr. Nauky, Kyiv 03028, Ukraine.*

The specific capacitance and dielectric losses are among the most important parameters of the capacitors. In many applications the dielectric losses must be very low. For example, in case of application of dielectrics in mm-wave detectors the dielectric losses limit the overall optical efficiency during transferring the mm-wave signal received at the antenna to the detectors. The dielectrics with high dielectric constant and low losses are also very attractive for use as the supercapacitors. On the contrary, in the case of using nanocomposite materials as an absorber of electromagnetic waves, the higher the dielectric losses, the better.

The dielectric properties of $\text{SiO}_x\&\text{Fe}_y\text{O}_z(\text{Fe})$ nanocomposite films with different ratio Fe and Si have been investigated in a wide frequency range under forward and reverse biases. In this context, parameters such as loss tangent ($\tan(\delta)$), dielectric constant (ϵ') and dielectric loss (ϵ'') were calculated from the capacitance and dissipation factor.

Nanocomposite films were prepared by ion plasma deposition. The combined target containing silicon and iron parts was used. The area ratios of the iron and silicon parts of the target were fixed: $\text{Fe:Si} = 2:1$; $\text{Fe:Si} = 1:1$; $\text{Fe:Si} = 1:2$. Also, $\text{Fe}_y\text{O}_z(\text{Fe})$ (Fe:Si ratio = 1:0) and SiO_x (Fe:Si ratio = 0:1) films were deposited, which were used as extreme cases of the composition of the $\text{SiO}_x\&\text{Fe}_y\text{O}_z(\text{Fe})$ nanocomposite films. The measurements of the dielectric properties of the nanocomposite $\text{SiO}_x\&\text{Fe}_y\text{O}_z(\text{Fe})$ films were carried out using the Agilent 4249A semiconductor parameter analyzer in the frequency range of 5 kHz – 5 MHz. To calculate the ϵ' and ϵ'' , the parallel capacitance and dissipation factor were measured simultaneously. The analysis of dielectric losses was carried out at bias of the MIS structure into the region with accumulation of the major carriers in the near-surface region of the semiconductor to eliminate the influence of the substrate. The dependencies of the dielectric loss tangent ($\tan(\delta)$) on voltage for the structures with initial (non-annealed) nanocomposite $\text{SiO}_x\&\text{Fe}_y\text{O}_z(\text{Fe})$ films and after the thermal annealing at $T = 1000^\circ\text{C}$ were studied. The frequency dependencies of dielectric losses at the fixed voltage $U = -5$ V for the structures with both initial and annealed nanocomposite films are shown in Fig. 1 and Fig. 2 respectively.

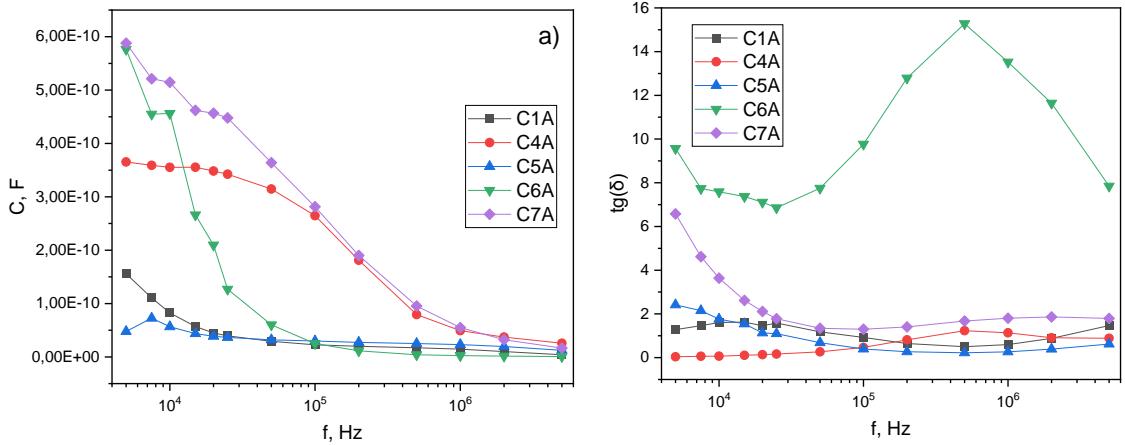


Fig. 1. Frequency dependences of the capacitance (a), dielectric loss tangent (b) for the initial nanocomposite $\text{SiO}_x\&\text{Fe}_y\text{O}_z(\text{Fe})$ films. C1: $\text{Fe}/\text{Si} = 0/1$, C5: $\text{Fe}/\text{Si} = 1/2$, C4: $\text{Fe}/\text{Si} = 1/1$, C6: $\text{Fe}/\text{Si} = 2/1$, C7: $\text{Fe}/\text{Si} = 1/0$.

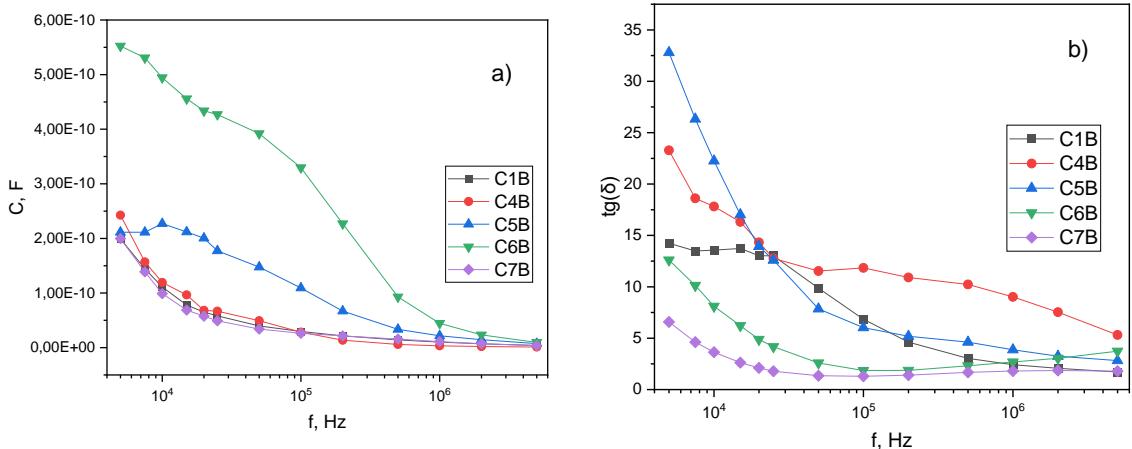


Fig. 2. Frequency dependences of the capacitance (a), dielectric loss tangent (b) for the annealed initial nanocomposite $\text{SiO}_x\&\text{Fe}_y\text{O}_z(\text{Fe})$ films. C1: $\text{Fe}/\text{Si} = 0/1$, C5: $\text{Fe}/\text{Si} = 1/2$, C4: $\text{Fe}/\text{Si} = 1/1$, C6: $\text{Fe}/\text{Si} = 2/1$, C7: $\text{Fe}/\text{Si} = 1/0$.

As can be seen in Fig. 1, Fig. 2, the $\tan(\delta)$ in general decrease with the frequency growth. Only the initial film with the $\text{Fe}/\text{Si} = 1/0$ ratio (Fe_yO_z) demonstrate the nonmonotonous frequency dependence. As a rule, the dielectric losses are remarkably increased after the thermal annealing. The growth of dielectric losses is caused by structure transformation of the films during annealing. In case of initial films the highest dielectric losses for the films of Fe_yO_z has been observed. Annealed films demonstrate the highest losses in low frequency region for the film with $\text{Fe}/\text{Si} = 1/2$ ratio. But in high frequency region the film with $\text{Fe}/\text{Si} = 1/1$ ratio has the highest dielectric losses.

Дослідження поверхні монокристалічного CdTe, імплантованих іонами хрому

А.В. Попович¹, В.Д. Попович^{1,2}, R. Mroczka³, P. Sagan⁴, І.Д. Столярчук¹, В.Р. Карпій¹,
M. Kuzma⁵

¹Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, вул. Івана
Франка 24, 82100 Дрогобич, Україна andriy.popovich@dspu.edu.ua

²Національний університет “Львівська політехніка”, вул. С. Бандери 12, 79000
Львів, Україна

³ The John Paul II Catholic University of Lublin, Konstantynów 1J str., 20-708 Lublin,
Poland

⁴Maria Curie-Skłodowska University, pl. Maria Curie-Skłodowska 1, 20-031 Lublin,
Poland

⁵University of Rzeszow, 1 Pigonia Str., 35-959 Rzeszow, Poland

Іонна імплантация часто використовується, щоб наситити поверхневі шари напівпровідників високою концентрацією домішок. У нашому попередньому дослідженні [1] її було застосовано з метою легування монокристалів CdTe хромом понад межу його розчинності у цій сполузі для отримання магніторозчиненого напівпровідника з температурою Кюрі, вищою за кімнатну. Монокристалічні зразки CdTe, вирощені з газової фази, імплантувалися високими дозами (10^{16} , 10^{17} та $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$) іонів Cr⁺ з енергією 500 кеВ. У цій роботі досліджується вплив такої імплантациї на стан поверхонь зразків. Для цього було використано методи атомно-силової мікроскопії, рамановської спектроскопії та дифракції швидких електронів на відбиття. Вивчалися зразки з {110}-орієнтованими поверхнями, що були приготовлені хіміко-механічним поліруванням у 5 % розчині брому в диметилформаміді та етиленгліколі.

Атомно-силові дослідження виявили, що шорсткість поверхонь зразків, опромінених дозами 10^{16} та 10^{17} см^{-2} , підвищується від середнього значення $R_a=1,1 \text{ нм}$ до $R_a=2,7 \text{ нм}$ і $R_a=3,9 \text{ нм}$, відповідно, що свідчить про їх незначне радіоактивно-індуковані порушення. Зі збільшенням дози до $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ шорсткість різко зростає (до $R_a=24,2 \text{ нм}$), що добре узгоджується із результатами роботи [1].

Результати рамановських досліджень показано на рис. 1. Найбільш чіткі спектри отримано для флюенсу у $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$. Найінтенсивніші смуги ідентифіковано як повздовжні LO та поперечні TO моди CdTe [2]. Пік при $\sim 120 \text{ см}^{-1}$ відповідає фонону з симетрією E у телурі [3], преципітати якого було виявлено в усіх зразках за допомогою рентгенівської дифрактометрії [1]. У спектрі зразка, опроміненого дозою 10^{17} см^{-2} , він відсутній, як і TO мода CdTe. Для найменш імплантованого зразка можна розрізнити лише 1LO та 2LO моди, а домінуючою є широка смуга в області $400 - 900 \text{ см}^{-1}$, на якій виділяються окремі піки. У цій же області фіксується сигнал від вихідного зразка. Природа смуги

не до кінця зрозуміла, але у цьому діапазоні часто виявляють моди оксидів телуру [3].

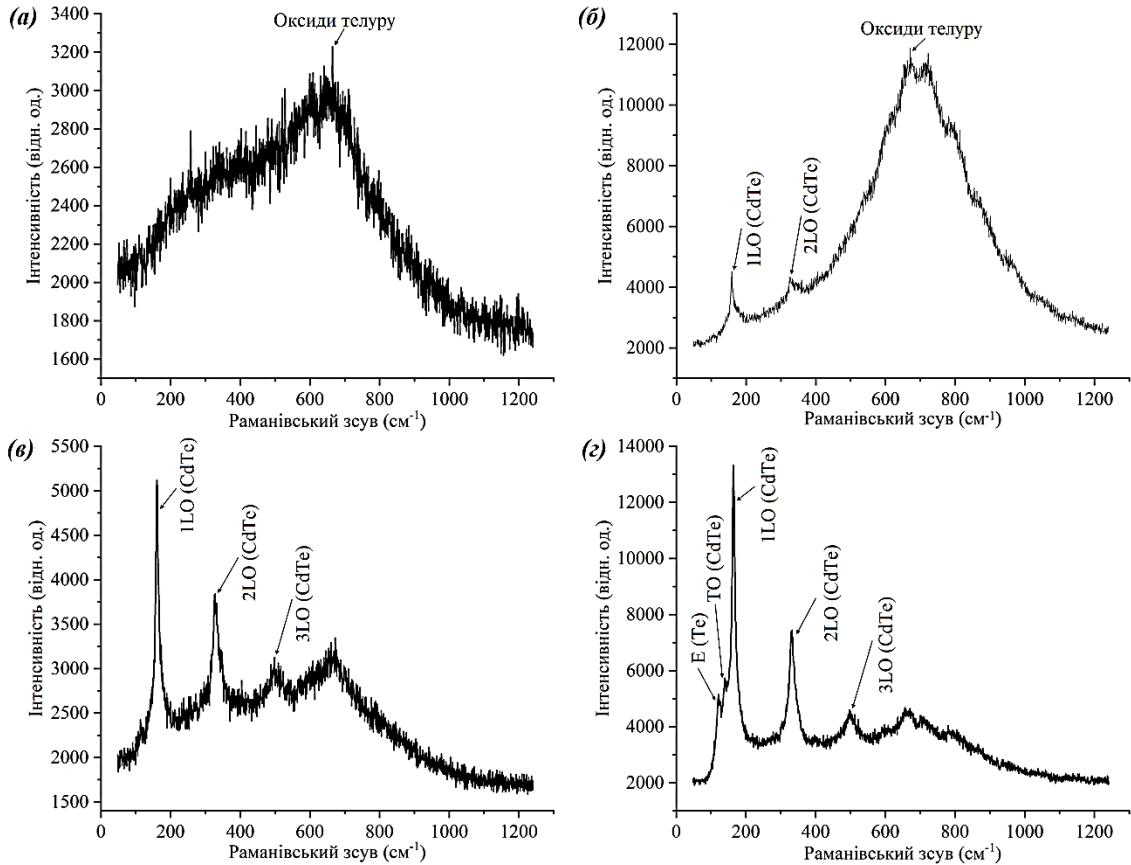


Рис. 1. Типові рамановські спектри вихідного зразка CdTe (а) та зразків, імплантованих дозами 10^{16} (б), 10^{17} (в) і $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ (г) іонів Cr^+ .

Описані особливості можна пояснити, якщо припустити формування дрібнокристалічного чи аморфізованого та збагаченого Te шару на хіміко-механічно полірованій поверхні зразків [4]. Збудження рамановських спектрів здійснювалося випромінюванням лазера з довжиною хвилі 785 нм, що практично повністю поглинається у аморфізованому шарі. Імплантация супроводжується розпиленням мішені, особливо для найвищої дози [1], призводячи до видалення цього шару та появи мод CdTe. Таке припущення підтверджується результатами електронної дифракції: електронограма вихідного зразка складається з широких дифузійних кілець, тоді як для зразків, опромінених двома найвищими дозами Cr^+ , вона містить чіткі точкові рефлекси, що відповідають структурі кубічного CdTe.

8. V.D. Popovych, R. Böttger, R. Heller, S. Zhou, M. Bester, B. Cieniek, R. Mroczka, R. Lopucki, P. Sagan, M. Kuzma *Nucl. Inst Meth. Phys. Res. B* **419** (2018) 26.
9. Iu. Nasieka, M. Boyko, V. Strelchuk, B. Danilchenko, L. Rashkovetskyi, P. Fochuk, *Sol. State Commun.* **196** (2014) 46.
10. A.S. Pine, G. Dresselhaus *Phys. Rev. B* **5** (1972) 4087.

Скануюча фотодіелектрична спектроскопія кристалів CdZnTe: нові дані про локалізовані стани носіїв заряду

О.О. Полубояров, О.М. Чугай, Ю.А. Волошин

Факультет радіоелектроніки, комп'ютерних систем та інфокомунікацій,
Національний аерокосмічний університет «Харківський авіаційний інститут»,
Україна, м. Харків, вул. Вадима Манька, 17

Загальновідомо, що отримання даних про енергетичний спектр, перетини захоплення та концентрацію локалізованих станів (ЛС) носіїв заряду є важливою частиною широкого кола досліджень, присвячених електричним властивостям напівпровідниківих кристалів. Одним із методів дослідження ЛС у кристалах типу CdZnTe є скануюча фотодіелектрична спектроскопія (СФДС) [1]. До особливостей цього методу відносяться відсутність впливу на зразок сильного (поляризуючого) електричного поля, а також зміни в широких межах температури зразка. Як розвиток методу СФДС у роботі [2] нами було запропоновано параметр, що описує зміну заселеності ЛС певного сорту при зовнішньому впливі на кристал. З цим параметром пов'язана окрема ділянка діаграми фотодіелектричного ефекту, яка являє спектральну залежність в параметричному вигляді дійсної та уявної частин комплексної діелектричної проникності. Тангенс кута нахилу ділянки (КНД) є відношенням вкладів фотоактивних станів певного сорту в частини проникності. Мета наших досліджень полягала у досліджені впливу частоти електричного поля f на КНД різних станів у кристалах.

Досліди проводили на кристалах $Cd_{1-x}Zn_xTe$ ($x = 0,12 \dots 0,20$), вирощених з розплаву методом Бріджмена. Виявлено п'ять глибоких ЛС акцепторного типу, віддалених від верху валентної зони не більше ніж на 0,5 еВ. Встановлено, що для всіх цих станів КНД залежить від частоти поля. При цьому в деяких з них зміна зазначеного параметра з частотою відповідає випадку фотозбудження, за якого домінуючий внесок в уявну частину діелектричної проникності вносять вільні носії, а внесок у дійсну частину слабко залежить від f . Висловлено припущення, що інший характер зміни КНД з частотою обумовлений складнішою будовою дефектного центру або його взаємодією з кристалічною граткою. На думку авторів, продовження досліджень зазначеного параметра в залежності від частоти та напруженості поля дозволять отримати додаткові відомості про природу дефектів, що породили глибокі ЛС у кристалах типу CdZnTe.

1. Chugai, O., Poluboiarov, O., Oliinyk, S., Sulima, S. (2024). Scanning Photodielectric Spectroscopy of CdZnTe Crystals. In: Krishnamoorthy, S., Iniewski, K.(. (eds) Advances in Fabrication and Investigation of Nanomaterials for Industrial Applications . Springer, Cham.
2. O.O. Chugai, O.O. Poluboiarov, S.V. Oleynick, S.V. Sulima, O.O. Voloshin, R.V. Zaitsev, M.V. Kirichenko. Scanning photodielectric spectroscopy of CdZnTe crystals under additional non-monochromatic illumination, Sensors and Actuators, A: Physical, Vol. 328, 2021, 112772

Дослідження імпедансу композитної мембрани з ПВБ і наноструктурованого вуглецю

Остапенко^a О. Ю., Кравченко^b С.О., Пилипчук^c О.С., Семененко^{b,c} М. О.

^aКНУ імені Тараса Шевченка, пр. Глушкова 4-г, 03022 Київ

^bІнститут фізики напівпровідників НАН України, пр. Науки 41, 03028 Київ

^cІнститут фізики НАН України, пр. Науки 46, 03028. Київ

У даній роботі висвітлені результати досліджень ємнісно-частотних характеристик композитної мембрани на основі полівінілбутирату (ПВБ) та сильноагломерованих вуглецевих наноструктур. Композитна мембра розглядається як проміжний шар для узгодження висоти барерів між гетеропереходам у органічних фотоелектрических перетворювачах.

Залежності ємності ($C(\omega)$) і тангенса кута діелектричних втрат ($\operatorname{tg}(\omega)$) від частоти вимірювалися приладом lcr 1x200 Rhode&Schvartz. Еквівалентна схема вимірювання відповідала конфігурації CpD, амплітуда сигналу 0.1V, затримка між вимірюванням 0.5с, вимірювання проводилися в темновому режимі. Для визначення механізму поляризації було побудовано графіки $C(\omega)$ і $\operatorname{tg}(\omega)$ рис. 1. За характером графіків було визначено, що еквівалентна схема відповідає паралельному підключення ємності та опору з присутністю резонансного контура, відповідно до моделі осцилятора [1].

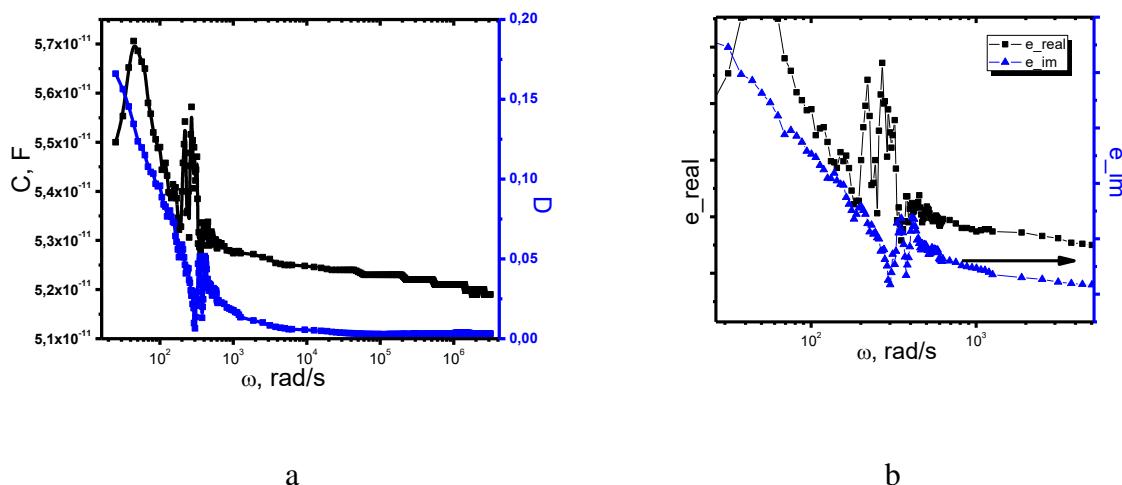


Рис. 1: а) $C(\omega)$ і $\operatorname{tg}(\omega)$ від частоти (Гц) б) графіки діелектричної функції;

Форма кривих на рис. 1 відповідає поведінці поляризації з резонансом, яку можна описати моделями RC- або СРЕ-контурів. На рис. 1б спостерігається вузький резонанс із характерними кутовими частотами близько 320 рад/с, що вказує на слабке загасання (малий демпфінгуючий коефіцієнт 0.001) і високу впорядкованість структури. Час релаксації для всіх зразків знаходиться в діапазоні 3.1–3.2 мс, що

узгоджується з інтерфейсною або дипольно орієнтованою поляризацією. Слабка дисперсія реальної частини ϵ_{real} , разом з малою різницею між $\epsilon(0)$ і $\epsilon(\infty)$ свідчать про структурну стабільність системи й обмежену участь диполів у високочастотній поляризації. Графік на Рис. 2. демонструє низьку провідність (високий імпеданс), плавний спад уявної частини, відсутність чіткого напівколо (характерного для простого $R \parallel C$ контуру), що вказує на комплексну поведінку із домінуванням реактивного (емнісного) компоненту і можливу різноманітність шляхів заряду — як через матрицю, так і через лінійно протяжні агломерати. Такий графік типовий для структур з сильною ємнісною реакцією (слабко провідна, із пастками заряду або бар'єрами). Високі значення Z_{real} (до 10^8 Ом) підтверджують, що електронна/іонна провідність обмежена. Відсутність півкола або петель може вказувати на єдину домінуючу міжфазову реакцію. Дослідження структура демонструє високу імпедансну відповідь на низьких частотах, що може бути пов'язано з ізоляційною природою матриці/оточення або відсутністю хорошого контакту між частинками в композиті. Смішана поведінка рис. 3. панує в широкому діапазоні частот — з типовим спадом $|Z|$ і фазовим зсувом, близьким до -90° , що характерно для діелектриків або структур із внутрішнім зарядовим зберіганням. Фактичне значення ($\sim -88^\circ \dots -90^\circ$) підтверджує домінування ємності над активною провідністю. У частотному діапазоні до $\sim 10^2$ Гц — значне падіння імпедансу, яке пов'язане з переходом між зарядовими станами. Вище 1 кГц — вихід на асимптоту (станціонарна діелектрична поведінка). Повна відсутність індуктивного підйому фази (до 0° або позитивних значень) також вказує на відсутність індуктивних компонентів. Можна припустити, що провідність слабка або повністю обмежена, а імпеданс формується переважно через міжфазові ефекти (бар'єри Шотткі, пастки заряду, поверхнева ємність тощо).

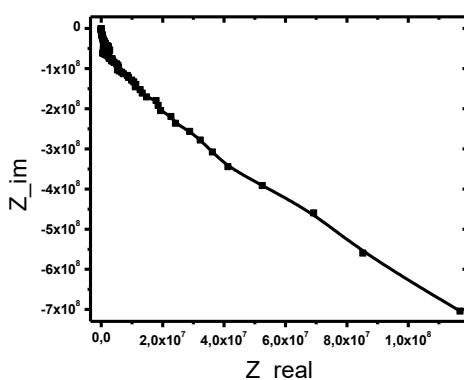


Рис. 2. Діаграма Ніквіста.

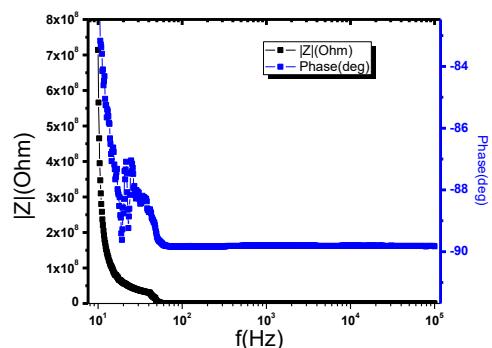


Рис. 3. Фазова діаграма.

[1] Фізичне матеріалознавство: Навч. посіб. / Ю. М. Поплавко, Л. П. Переверзєва, С. А. Воронов, Ю. І. Якименко. – К.: НТУУ «КПІ», 2007. – Ч. 2: Діелектрики. – 392 с.

Застосування алгоритмів машинного навчання до обчислення рухливості носіїв заряду у кремнії

Олег Оліх, Іван Кущ

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
Україна, 01601, місто Київ, вул. Володимирська, 64/13
olegolikh@knu.ua

Методи машинного навчання (МН) все ширше застосовуються у різноманітних галузях фізики, дозволяючи, прискорювати пошук матеріалів із заданими властивостями, полегшувати обробку вимірювань чи оптимізувати розрахунки, наприклад завдяки використанню спеціалізованих міжатомних потенціалів [1]. Проте підхід, коли МН є чорною скринькою, що отримує на вхід дані та робить передбачення без обґрунтування результатів поступово перестає задовільняти. Одним із варіантів інтерпретованого МН є Symbolic Regression [2] (SR), який дозволяє отримати математичний вираз, що прозоро поєднує вхідні та вихідні параметри.

У роботі застосувався підхід SR до задачі оцінки рухливості μ носіїв заряду у кремнії. Завдання обчислення μ за певних температури та концентрації легуючої домішки є достатньо поширеним у фізиці напівпровідників, зокрема при моделюванні сонячних елементів. Незважаючи на можливість використання перших принципів для відповідних розрахунків, більш зручним є використання наближених виразів, які враховують особливості розсіяння електронів та дірок у тому чи іншому матеріалі. Для кремнію найбільш точним вважається підхід Klaassen [3]. Проте в цьому випадку передбачається використання близько 20 констант і тому на практиці часто застосовується більш простіший, проте менш точний підхід, запропонований Arora [4].

Використовуючи як тренувальний набір значення, розраховані відповідно до теорії Klaassen [3], були отримані апроксимуючі вирази, що описуються рухливістю електронів та дірок коли вони є як основними, так і неосновними носіями:

$$\mu_{n,n} = \frac{N_{d,n} + 1413,197}{T_n^{2,2508} + \frac{\left(\frac{N_{d,n}}{0,872766T_n + 0,0728199} \right)^{0,721} (0,2152N_{d,n}^{0,58024} + 10,496T_n - 1,34188)}{0,2152N_{d,n}^{0,58024} + 10,496T_n + \left(\frac{N_{d,n}}{0,872766T_n + 0,072819895} \right)^{0,721} - 1,34188}} \quad (1)$$

$$\mu_{p,p} = N_{d,n}^{0,4486} + \frac{469,99396}{T_n^{2,25048} + \frac{1,5324200358 N_{d,n}^{0,9256572} T_n \left(\frac{1}{T_n} \right)^{0,754558}}{2,6517315 N_{d,n}^{0,1669551} T_n + 0,57789411779 N_{d,n}^{0,7587021} \left(\frac{1}{T_n} \right)^{0,754558}}} \quad (2)$$

$$\mu_{n,p} = 26,318 \left(\frac{N_{d,n}}{N_{d,n} + 191,785} \right)^{0,622} + \frac{1412,3245}{T_n^{2,2496} + \frac{10,953 N_{d,n}^{0,10296} T_n \left(\frac{N_{d,n}}{T_n + 0,7073} \right)^{0,7162}}{5,699 N_{d,n}^{0,10296} T_n + 1,922 \left(\frac{N_{d,n}}{T_n + 0,7073} \right)^{0,7162}}}$$

(3)

$$\mu_{p,n} = \frac{0,02258 N_{d,n} \log T_n}{\log T_n + 0,62785} + \frac{113.56397}{0,1562 T_n^{2,9406} + \left(\frac{N_{d,n}^{0,60845} T_n^{1,14302}}{1,1508 N_{d,n}^{0,60845} + 4,2095 T_n^{1,14302}} \right)^{1,1768}}^{0,7655} \quad (4)$$

де перший нижній індекс визначає тип носіїв, другий – тип провідності кристалу, T_n та $N_{d,n}$ – нормовані температура та концентрація легуючої домішки: $T_n = T / 300$, $N_{d,n} = N_d / 10^{17}$. Вирази (1)-(4) справедливі для невиродженого Si з концентрацією легуючої домішки $10^{13}\text{-}10^{19} \text{ см}^{-3}$ для температурного інтервалу 200-500 К.

Крім того, були побудовані стандартні регресійні моделі, призначені для оцінки рухливості на основі значень температури та ступеня легування, які базуються на використанні алгоритмів Random Forest (RF), Gradient Boosting (GB), Support Vector Regression (SVR), Deep Neural Network (DNN). Отримані значення метрик точності (mean absolute percentage error MAPE; максимальна величина відносної похибки APE_{\max} та mean absolute error MAE) різних підходів представлені у Табл. Як видно, запропоновані вирази перевищують за точністю показниками не лише класичний підхід Arora, але й інші алгоритми МН.

Табл. Метрики відхилень розрахованих значень рухливості у кремнії від теорії Klaassen

Метод обчислень	MAPE, %				APE_{\max} , %				MAE, $\text{cm}^2/\text{V s}$			
	n_n	n_p	p_p	p_n	n_n	n_p	p_p	p_n	n_n	n_p	p_p	p_n
Arora [4]	5.35	20.3	5.62	37.8	38.2	70.7	17.6	111	45.7	103	16	82.6
RF	1.42	1.77	1.46	1.41	12.3	14.4	14.5	12.6	11.6	14.1	4.40	4.76
SVR	0.108	0.087	0.098	0.082	1.71	2.16	2.26	3.56	1.20	1.03	0.394	0.410
GB	1.32	1.60	1.82	1.23	1.42	11.7	15.0	8.48	11.3	13.4	5.92	4.19
DNN	0.374	0.623	0.655	0.671	2.23	3.75	5.96	2.97	3.58	3.49	2.88	1.97
Eqs.(1)-(4)	0.094	0.141	0.140	0.049	1.19	1.05	1.48	0.61	0.475	0.764	0.313	0.119

О.О. висловлює подяку за фінансову підтримку роботи Національному фонду досліджень України (проект № 2023.05/0024).

- [1] L. Yu, K. Dong, Q. Yang *et al.* Appl. Phys. Lett. **125**, 213101 (2024)
- [2] D. Angelis *et al.* Arch. Comput. Meth. Eng. **30**, 3845 (2023)
- [3] D. Klaassen. Solid-State Electron. **35**, 953 (1992)
- [4] N. Arora *et al.* IEEE Trans. Electron Devices, **29**, 292 (1982)

Cu-related paramagnetic centers in Cu and Cu-Y- doped ZrO₂ ceramics

Valentyna Nosenko^{1,2}, Igor Vorona¹, Volodymyr Trachevsky³, Yuriy Zagorodniy⁴, Sergey Okulov¹, Oksana Isaieva¹, Volodymyr Yukhymchuk¹ and Larysa Khomenkova¹

¹V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of NAS of Ukraine, 45 Pr. Nauky, Kyiv, 03028, Ukraine

²National university "Kyiv-Mohyla academy", 2 Skovorody str., Kyiv 04070, Ukraine

³Technical Center of NAS of Ukraine, 13 Pokrovs'ka Str., Kyiv, 04070, Ukraine

⁴Frantsevych Institute for Problems of Materials Science, National Academy of Sciences of Ukraine, 3 O.Pritsaka str., Kyiv, 03142, Ukraine

Zirconium oxide, ZrO₂, exhibits a number of remarkable properties, such as hardness, transparency, high refractive index, chemical stability and high melting point, which have led to its use in the production of coatings, catalysis, sensor applications and so on. Copper doping improves the catalytic properties of ZrO₂, which can be used to make highly efficient catalysts. This is believed to be due to the formation of complexes containing copper, oxygen and hydrogen atoms on the surface of zirconium oxide powder granules. Previous studies have shown that when zirconium oxide powders and ceramics are doped with copper, the latter can both be incorporated into the ZrO₂ structure and form various complexes on the surface. Thus, paramagnetic centers Cu_{Zr}²⁺ were detected in Y-stabilized ZrO₂ ceramics, as well as aggregates of Cu atoms, CuO molecules, crystalline CuO located on the surface of granules and/or between powder grains [1-4]. However, these works were not systematic. Therefore, we carried out systematic EPR, NMR and Raman investigation of the paramagnetic centers associated with copper in Cu-doped and (Cu,Y)-codoped ZrO₂ nanopowders calcined at different temperatures. The dependence of the formation of these paramagnetic centers on the concentration of introduced copper and the effect of co-doping with yttrium were also investigated.

It was found the presence of three signals in EPR spectra: i) Signal A with g_⊥ = 2.063, g_{||} = 2.340 and A_{||}= 130 G; ii) Signal B with g~2.17, and iii) Signal C with g_x=2.021, g_y=2.026, g_z=2.168, A_{xx}~40×10⁻⁴ cm⁻¹, A_{yy}~35×10⁻⁴ cm⁻¹, A_{zz}~186×10⁻⁴ cm⁻¹, A_{xz}~10×10⁻⁴ cm⁻¹, A_{yz}~5×10⁻⁴ cm⁻¹. Based on a comparison of the results obtained by EPR, ¹H NMR and Raman methods, these signals were attributed to the surface Cu²⁺-(H₂O)_x complexes, superparamagnetic Cu or/and CuO_x nanoclusters on the grain boundaries, and Cu²⁺_{Zr} cations in the monoclinic ZrO₂, respectively. The contribution of these signals in the EPR and NMR spectra depends on the dopant concentration and the calcination temperature. The surface Cu²⁺-(H₂O)_x complexes are formed in the doped ZrO₂ powders with low dopant concentrations (\leq 1 mol.% CuO) at low temperatures (400°C). Superparamagnetic nanoclusters were observed in powders calcined at temperatures of 600 and 800°C. An increase in the Cu concentration led to a decrease in the temperature of the formation of

nanoclusters; that is, at concentrations larger than 1 mol.% CuO, they formed at 400 °C. At higher calcination temperature (1000°C), the destruction of Cu-related surface complexes takes place that favors Cu²⁺ ions incorporation into the bulk of ZrO₂ nanocrystals on the Zr position.

Thus, a comprehensive systematic study of copper-doped zirconium dioxide powders revealed that the incorporation of copper into the ZrO₂ powder structure is influenced by both the concentration of the alloying impurity and the calcination temperature. Varying the calcination temperature and the levels of yttrium and copper doping can effectively control the surface state of composite nanoparticles and the formation of copper complexes formed there. This, in turn, allows for the tuning and enhancement of the material's catalytic properties. Moreover, the use of the EPR method and the identification of copper related paramagnetic centers have proven to be powerful tools in detecting small quantities of paramagnetic centers and studying the formation and localization of copper complexes in Cu-doped ZrO₂ powders.

1. Ran, S.; Winnubst, L.; Blank, D.H.A.; Pasaribu, H.R.; Sloetjes, J.; Schipper, D.J. Effect of Microstructure on the Tribological and Mechanical Properties of CuO-Doped 3Y-TZP Ceramics. *J. Am. Ceram. Soc.* **2007**, 90, 2747–2752.
2. Samson, K.; Śliwa, M.; Socha, R.P.; Gora-Marek, K.; Mucha, D.; Rutkowska-Zbik, D.; Paul, J.; Ruggiero-Mikołajczyk, M.; Grabowski, R.; Śloczyński, J. Influence of ZrO₂ Structure and Copper Electronic State on Activity of Cu/ZrO₂ Catalysts in Methanol Synthesis from CO₂. *ACS Catal.* **2014**, 4, 3730–3741.
3. Korsunska, N.; Baran, M.; Polishchuk, Y.; Kolomys, O.; Stara, T.; Kharchenko, M.; Gorban, O.; Strelchuk, V.; Venger, Y.; Kladko, V.; et al. Structural and Luminescent Properties of (Y,Cu)-Codoped Zirconia Nanopowders. *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **2015**, 4, N103–N110.
4. Vorona, I.P.; Nosenko, V.V.; Golub, V.O.; Okulov, S.M.; Khomenkova, L.Y.; Korsunska, N.O.; Melnichuk, O.V. New Paramagnetic Center in Cu-Doped Y-Stabilized ZrO₂. *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **2020**, 9, 033002.

PHOTOLUMINESCENCE OF «GREEN» SYNTHESIZED Ag-In-Se PARTICLES IN COLLOIDAL SOLUTION AND THIN FILM

A. Nikolaienko,¹ O. Kapshuchenko,¹ A. Karlash,¹ A. Dmytruk²

¹ Faculty of Radiophysics, Electronics and Computer Systems, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv 01601, Ukraine. E-mail: asya.nikolaenko@gmail.com

² Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv 03028, Ukraine

Ternary semiconductor (nano)particles based on I-III-VI compounds have garnered significant attention due to their unique properties, which open up a broad spectrum of potential applications. Among them, silver-based Ag-III-VI chalcogenides (where III = In, Ga; VI = S, Se, or Te) have found extensive use in optoelectronic technologies, including photovoltaic cells, narrowband optical filters and thin films for solar energy devices [1], and in medicine in the form of colloidal solutions, in particular in magnetic resonance imaging, optical diagnostics, and photodynamic therapy [2]. In these fields, the particles may be exposed to elevated temperatures. However, to our knowledge, studies on their photoluminescence (PL) at elevated temperatures have not yet been reported. This report fills that gap.

Various approaches to the synthesis of AgInSe_2 particles have been reported [1,2,3]. However, many of these techniques involve intricate procedures, high temperature conditions, extended synthesis duration, and the simultaneous use of multiple stabilizing agents to control particle size. In the present study, a green synthesis route is elaborated to obtain colloidal Ag-In-Se particles in an aqueous medium. This environmentally friendly method circumvents the aforementioned challenges.

The synthesis of Ag-In-Se nanoparticles involves dissolving the precursor salts of silver nitrate (AgNO_3), indium nitrate ($\text{In}(\text{NO}_3)_3$) and a selenium-containing solution in water with L-cysteine acting as a stabilizer. The procedure is carried out at room temperature and atmospheric pressure. Specifically, 0.085 g of AgNO_3 is dissolved in 10 ml of distilled water to obtain a 0.05 M solution. Similarly, 0.15 g of $\text{In}(\text{NO}_3)_3$ is dissolved in distilled water. For the selenium precursor, a mixture of 0.04 g of selenium powder and 0.19 g of sodium sulfite (Na_2SO_3) is dissolved in 10 ml of water and stirred vigorously at 100 °C for one hour. The main reaction consists of dissolving 0.18 g of L-cysteine in 3 ml of water. Then, 0.2 ml of silver nitrate, 1.2 ml of indium nitrate, and 2 ml of hot selenium solution (Na_2SeSO_3) are sequentially added to the solution. The mixture darkens during the reaction, so stirring is necessary until the mixture reaches a uniform dark brown color.

PL properties of the synthesized particles were investigated using an SDL2 spectrometer and He-Cd laser (442 nm) for excitation. Before the measurements, the solutions were cooled to room temperature. The resulting particles have a strong absorption, so the solutions were diluted 33 times.

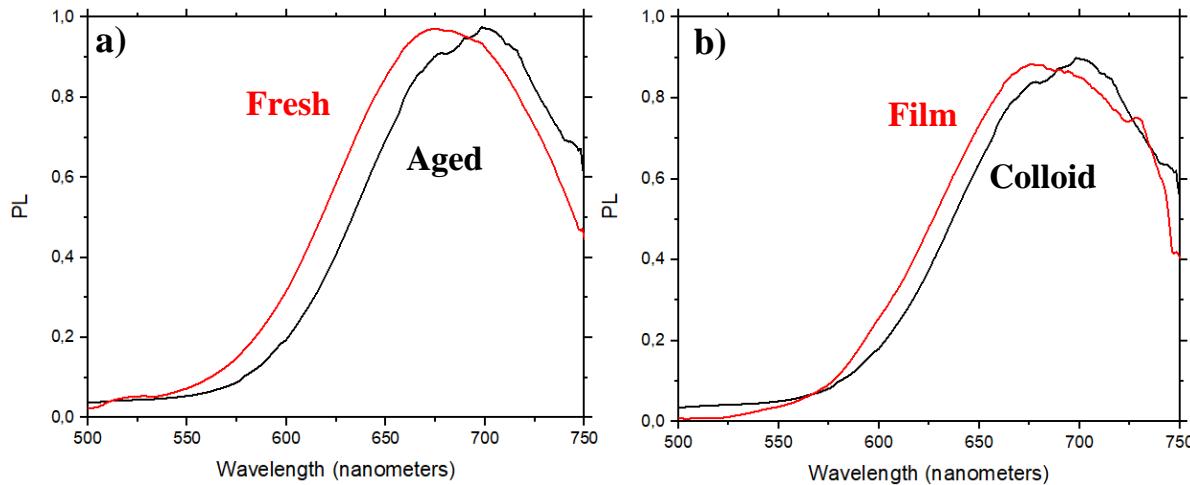


Fig.1. Normalized PL spectra of Ag-In-Se particles under 442 nm excitation a) fresh colloid vs one-year aged colloid; b) dried (film) vs colloid.

Fig. 1,a shows the luminescence spectra of the synthesized Ag-In-Se particles with a molar ratio of Ag: In : Se = 0.4 : 1.2 : 2, and one-year aged ones. A 20 nm shift to the red is observed: fresh sample has peak at 680 nm, aged – at 700 nm. Fig. 1,b compares the spectra of dried particles (thin film) and colloidal solution. The dried Ag-In-Se particles have a luminescence peak at 670 nm, thus shifted 10 nm to blue.

Studies of PL on elevated temperatures reveal an exponential decrease of the PL intensity up to about 80°C, and linear decrease above that temperature. This finding helps to understand the physics of the large Stokes shift and slow kinetics of PL decay in these particles [4].

References:

- [1] [N. Karunagaran, P. Ramasamy, Synthesis, growth and characterization of AgInSe₂ single crystals. Materials Science in Semiconductor Processing, 40, 2015, DOI:10.1016/j.mssp.2015.07.040](#)
- [2] Dawei Deng, Lingzhi Qua and Yueging Gu, Near-infrared broadly emissive AgInSe₂/ZnS quantum dots for biomedical optical imaging, *Journal of Materials and Chemistry C*, 2 (34), 2014, DOI:10.1039/C4TC01147C
- [3] N. Doskaliuk, Y. Babyuk, A. Hotynchan, G. Okrepka and Y. Khalavka. Tuning Optical Properties of AgInS₂ Quantum Dots by the Change of Ag-In Stoichiometry for their Light-emitting Applications. *2020 IEEE 10th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP)*, 2020, DOI: 10.1109/NAP51477.2020.9309659
- [4] V. Kopach, Y. Khalavka, Y. Yosypenko, N. Doskaliuk, O. Kopach, M. Dmytruk, I. Dmytruk, A. Dmytruk, Accelerated Charge Transfer in the AgInS₂-Polymer Layer-by-Layer Films, *Luminescence*, 39 (10), 2024, DOI:10.1002/bio.70001

The influence of impurities on the mechanical properties of PbTe and PbSe binary compounds

V. Nicorici¹, P. Ketrush¹, D. Grabco², O. Shikimaka²

¹ State University of Moldova, Mateevici str., 60, Chisinau, MD-2009, Republic of Moldova

²Institute of Applied Physics, State University of Moldova, Academy str., 5, Chisinau, MD-2028, Republic of Moldova

The semiconductor compounds PbTe and PbSe have a series of interesting physical properties and can be used in the creation of thermoelectric devices and, especially, in infrared technology, due to the narrow band gap (0.19 eV and 0.165 eV at 0 K for PbTe and PbSe, respectively) [1].

Lead chalcogenides crystallize in a cubic lattice of the NaCl type. The unit cell is a face-centered cube with a lattice constant of 6.462 Å (PbTe) and 6.126 Å (PbSe). The doping with impurities with variable valence, which include impurities of group III, leads to a fundamental modification of the energy spectrum of charge carriers.

For successful application, the grown semiconductor materials must be durable and wear-resistant under various mechanical influences.

The mechanical properties of crystals of binary compounds PbTe and PbSe with the same quantitative content of impurities of group III (In, Ga, B) and Cd, namely 0.5 at.%, were investigated. To study the mechanical properties, the quasi-static indentation method was used on a PMT-3 device. The loads were selected in such a way that the smallest load, 50 mN, was from the nano-load region, the largest, 500 mN, was from the micro-load region, and the average, 200 mN, was intermediate between nano- and microloads. At each load, 10 imprints were applied; the hardness was calculated as the arithmetic average by using the well-known formula [2]:

$$H = \frac{1854P}{d^2},$$

where P – is the indenter load, d – is the Vickers indentation diagonal. The error in microhardness measurements was less than 4%. The surface microstructure of the samples and indentations was studied by using an XJL-101 optical microscope with digital monitoring.

As follows from Fig. 1a, the microhardness of undoped PbSe crystals is significantly higher (curve 12) than that of PbTe (curve 1). Thus, at a load of 50 mN, the microhardness is 0.693 GPa and 0.54 GPa for PbSe and PbTe, respectively. Also, the course of the $H(P)$ curves is sharply different for these crystals. Lead selenide crystals demonstrate a sharp increase in hardness in the region of nano load ($P=50$ mN) (curve 12), while the course of the curve for PbTe has a smooth descending form (curve 1).

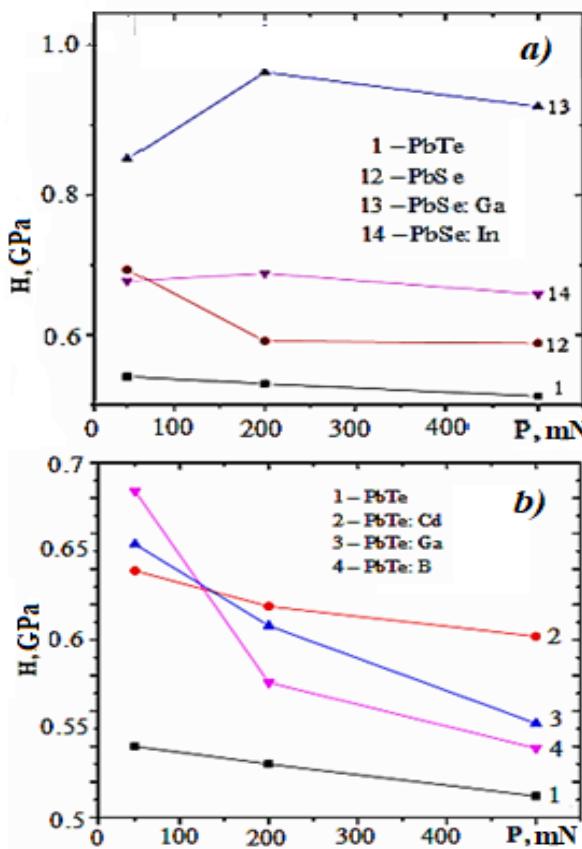


Fig. 1. Microhardness as a function of applied load in PbSe (a) and PbTe (b) crystals.

to the curve for pure PbTe, then increases sharply with a decrease in load from 200 mN to 50 mN, thereby exhibiting the so-called Indentation Size Effect (ISE) [3]. There are two types of ISE, “direct” and “reverse”. Direct ISE is explained by the Gao-Nix theory, which states that with decreasing load, the deformable zone decreases, and, accordingly, the probability of growth dislocations entering this zone, which contribute to plastic deformation, decreases. Reverse ISE is associated with the involvement of the interstitial mechanism in the process of plastic deformation. In our case, direct ISE was noted on three types of samples: PbSe, PbTe:B and PbTe:Ga, and reverse – on two types: PbSe:In, PbSe:Ga.

1. V. Beshliu, A. Nicorici, B. Nicorici. Yb impurity influence on parameters of PbTe crystals grown from the melt. *Proceedings of Intern. Semiconductor Conference, Sinaia (Romania) 2000*, vol. 1, p. 131 – 134.
2. Iu. Boyarskaya, D. Grabco, M. Katz. Physics of microindentation processes, Chisinau, Shtiintsa, 1986, 294 p. (in Ru.)
3. Golovin Yu. I. Nanoindentation and mechanical properties of solids in submicrovolumes, thin near-surface layers, and films: a review // *Physics of the Solid State*. 2008. v. 50. № 12, pp. 2205-2236.

Note that doping with impurities is accompanied by strengthening of both PbSe and PbTe crystals (Fig. 1), and the Ga impurity introduces much greater strengthening (more than 0,8 GPa) compared to other impurities, with the exception of the boron impurity (samples 13 and 3 at $P=50$ mN). A distinctive feature of the $H(P)$ dependence for PbSe:Ga is a significant increase in microhardness at loads of 200 mN and 500 mN. With increasing load, the behavior of the $H(P)$ dependences for pure PbTe and PbTe containing cadmium and gallium impurities is identical (curves 1–3), namely, the microhardness decreases smoothly. The $H(P)$ curve for the PbTe:B crystal in the range $P=500$ –200 mN is almost parallel

Synthesis, electronic structure, and optical properties of polycrystalline $\text{Bi}_2\text{WO}_6:\text{xEu}$

S.G. Nedilko¹, V. Boyko², V. Borysiuk¹, V. Chornii^{1,2}, Yu. Hizhnyi^{1,3}, O. Gomenyuk⁴, V. Sheludko⁴, K. Terebilenko¹

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601 Kyiv, Ukraine

²National University of Life and Environmental Sciences of Ukraine, 03041 Kyiv, Ukraine

³Donetsk Institute for Physics and Engineering of NAS of Ukraine, 03028, Kyiv, Ukraine

⁴Oleksandr Dovzhenko Hlukhiv National Pedagogical University, 41400, Hlukhiv, Ukraine

Bismuth tungstate, Bi_2WO_6 , is a wide band-gap semiconductor that reveals a variety of useful chemical and physical properties, namely, ferroelectricity, photocatalytic performance, and nonlinear dielectric susceptibility [1]. It was reported earlier that doping with rare-earth (RE) ions improves some properties, e.g., photocatalytic and optical ones [2, 3]. Such an effect can be ascribed to changes in the crystal structure of the host, like that observed for RE-doped BiPO_4 . It is known that an undoped Bi_2WO_6 crystal can be in orthorhombic (low and intermediate temperatures) or monoclinic phases. Phase transition between two Bi_2WO_6 orthorhombic phases occurs at 660 °C, while the transition to monoclinic phase is observed at the Curie point ($T \sim 960$ °C). The doping with RE ions can impact on the crystal lattice and vary abovementioned temperature points. Moreover, RE dopants, especially Eu^{3+} ions can play a role of luminescent probe of crystalline structure behavior.

The series of $\text{Bi}_2\text{WO}_6:\text{xEu}$ ($x = 0.5 - 15$ mol. %) was prepared using a conventional solid-state technique based on Bi_2O_3 , WO_3 , and Eu_2O_3 as starting materials. Each batch has been thoroughly ground in an agate mortar and kept at 600, 650, 700, 750, 800, and 900 °C for 6 h at each temperature with intermediate regrinding. The reaction progress has been checked by IR spectroscopy and X-ray powder diffraction.

X-ray diffraction (XRD) patterns have been recorded using a Shimadzu XRD-6000 diffractometer with a graphite monochromator. The IR spectra were recorded using a PerkinElmer Spectrum BX FTIR using the KBr technique. The UV-Vis diffuse reflectance spectra were recorded using a Shimadzu UV2600i spectrophotometer. The photoluminescence (PL) properties were studied using a DFS-12 spectrometer equipped with FEU-100 photomultiplier tube and DKsEL-1000 Xenon lamp as exciting light source. The electronic structure and optical properties of monoclinic and orthorhombic phases of Bi_2WO_6 were calculated within the DFT approach using the CASTEP package.

The XRD patterns for the samples annealed at 600 °C are typical for an amorphous phase, while crystalline products were obtained at higher

temperatures. The $\text{Bi}_2\text{WO}_6:0.5\%\text{Eu}$ annealed at 900 °C is a purely orthorhombic phase; intensive peaks of monoclinic Bi_2WO_6 were found in XRD patterns of the samples with higher dopant concentrations.

FTIR spectra of $\text{Bi}_2\text{WO}_6:\text{xEu}$ samples annealed at 900 °C are characterized by a set of narrow bands with 550-700 cm^{-1} , which are attributed to deformation vibrations of the tungstate group, and some wide bands in the range of 820-950 cm^{-1} , which are associated with valence vibrations of WO_6^{6-} molecular unit. All the samples reveal diffuse reflection coefficients over 80 % in the 550 – 850 nm region, dropping to about 15 ± 3 % at 400 nm. Optical band gap values of the samples were estimated from UV-Vis spectra using the widely known Kubelka-Munk formula and the Tauc plot. These values were about 2.68 eV for low Eu^{3+} concentration (0.5 and 1 mol. %) and 2.62 eV for higher dopant content.

The calculated partial densities of electronic states indicated that O *p* states and W *d* states dominate at the top of the valence band (TVB) and the bottom of the conduction band (BCB), respectively. The Bi *s* states are located at TVB for both orthorhombic and monoclinic phases. At the same time, Bi *p* states can be found at the BCB only in the case of orthorhombic Bi_2WO_6 . Thus, for this phase, light absorption by Bi^{3+} cations should be more important than for the monoclinic one.

The lines of Eu^{3+} ions luminescence dominate in PL spectra at all samples studied when excitation takes place at 463 nm. The PL excitation spectra consist of narrow bands of $^7\text{F}_0 \rightarrow ^5\text{D}_1$ and $^7\text{F}_0 \rightarrow ^5\text{D}_1$ transitions in europium, and also of relatively wide multicomponent band in the 240 - 300 nm spectral region was observed. This wide band can be ascribed to absorption by Bi^{3+} ions, WO_6 molecular anions, and $\text{O}^{2-} \rightarrow \text{Eu}^{3+}$ charge transfer. The results of the calculations are in accordance with the data of photoluminescence spectroscopy. In particular, the increase in Eu^{3+} concentration and, as a consequence, the content of monoclinic phase, leads to a decrease in the intensity of the component with maxima near 300 nm. This component can be related to the transition in Bi^{3+} cations.

- [1] Liu, X., & Fan, H. Q. (2018). Theoretical studies on electronic structure and optical properties of Bi_2WO_6 . *Optik*, 158, 962-969.
- [2] Ning, J., Zhang, J., Dai, R., Wu, Q., Zhang, L., Zhang, W., ... & Zhang, F. (2022). Experiment and DFT study on the photocatalytic properties of La-doped Bi_2WO_6 nanoplate-like materials. *Applied Surface Science*, 579, 152219.
- [3] Shanthi, S., Flower, N. A. L., Sujatha, R. A., Vinitha, G., & Rahulan, K. M. (2023). Role of defects on the nonlinear optical properties of La doped Bi_2WO_6 nanostructures for optical device applications. *Optical Materials*, 136, 113357.

The CuIn_xGa_{1-x}Se films deposition from granular target with RF magnetron sputtering in a “pulsating arc” mode

O.M. Slobodyan¹, A.V. Rusavsky¹, O.I. Gudymenko¹, V.M. Vlasiuk¹, A.P. Kostyliov¹,
S.V. Kondratenko², S.I. Tiagulskiy³, R. Yatskiv³, A.N. Nazarov^{1,4}, D. Flandre⁵

¹⁾Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

²⁾Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

³⁾Institute of Photonics and Electronics CAS, Praha, Czech Republic

⁴⁾National Technical University "Igor Sikorsky KPI", Kyiv, Ukraine.

⁵⁾ICTEAM, UCLouvain, Louvain-la-Neuve, Belgium.

Fourth component alloy adsorber films of CuInGaSe (CIGS) are used widely now due to high efficiency (about 23.6%), which can be obtained on CIGS solar cells. Usually, fabrication of CIGS films demands employment of enough complicated equipment and deposition temperature about 550°C. In this work we propose method of high quality CIGS absorber fabrication in magnetron sputtering equipment with using granulated CIGS target and temperature of substrate not more than 300°C. The CIGS absorber layer was deposited onto both glass and Ni/Mo flexible substrates (Fig.1(a)) using unordinary regime of RF (13.56 MHz) magnetron sputtering technique so named “pulsating arc mode” due to the increase in discharge current significantly higher than the glow discharge current values in the magnetron sputtering system. In this case the target surface is heated to the melting temperature of the material, which in turn increases the emission currents in the discharge gap and causes a significant increase in the discharge power. This mode of the generator leads to an increase in the current load above the limit, so the system automatically reduces the power to the preset values. Then the process is repeated.

SEM and EDS have shown well-formed CIGS layer granular structure with average grain sizes of 300-500 nm (Fig.1 (b,c)), while the elemental composition of material was found to be: Cu – 21.3%, In – 21.2%, Ga – 7%, Se – 50.5%. That is Ga/(Ga+In) = 25% and Cu/(Ga+In) = 76%, that indicates a slight deficiency of Ga and Cu in the deposited film.

Spectra of X-ray diffraction (XRD) in 2θ regime (Fig.2(a)) show the major diffraction peaks corresponding to CIGS chalcopyrite phase with composition Cu(In_{0.70}Ga_{0.30})Se₂, where a preferred orientations are (112), (220) and (312) at 2θ = 26.9°, 44.6° and 52.9°, and narrow half-widths of the peaks are very similar to material fabricated at 550°C, which has a good crystallinity and photo response (line #1 in Fig. 2 (a)).

Our material is Cu poor CIGS in which observed formation of Cu-poor Cu-In-Se ordered vacancy compound (OVC) phases (see Raman spectrum in Fig. 2 (b)). Presence of these phases in the surface region of the CIGS absorbers is assumed to be beneficial for the characteristics of the solar cells.

The CIGS films deposited on glass in optimal regime show electrical resistance about 1.6×10^2 Ohm \times cm and good photoresponse in photoconductance regime (changing of photocurrent up to 150% on level of dark current about 7×10^{-8} A (Fig.2 (c)). Estimation of optical band gap from spectral dependency of photoconductivity (Fig.2(d)) gives us value about 1.2 eV.



Figure 1. Photo of the CIGS film deposited on Ni/Mo foil (a), SEM image of surface morphology (b) and cross section of the film (c).

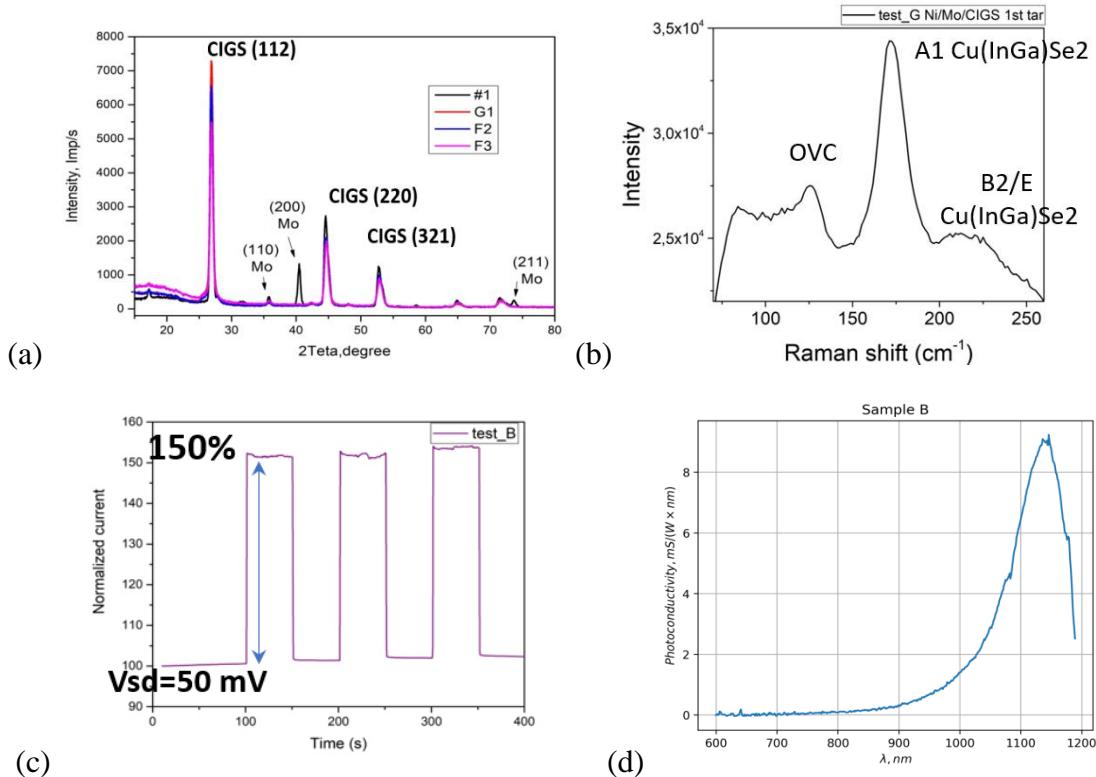


Figure 2. XRD spectra (a) and Raman spectrum (b) of the CIGS film on Ni foil. Photoresponce on lamp light (c) and spectral dependence of photoconductivity (d) for CIGS films on glass fabricated in optimal regime.

The work was supported partially by the Program Science for Peace and Security (NATO project SPS G5853).

Macroscopic and microscopic polarization of CuInP₂S₆ crystals

A. Molnar¹, H. Bán¹, D. Gál^{2,3}, V. Gerasimov⁴, A. Horvat¹,

¹ Uzhhorod National University, Uzhhorod, 88000 Ukraine

² HUN-REN Wigner Research Centre for Physics, Budapest, 1121 Hungary

³ University of Pécs, Pécs, 7624 Hungary

⁴ Mukachevo State University, Mukachevo, 89600, Ukraine

With the rapid beginning of graphene research, interest in layered van der Waals materials has grown significantly. Among them, the Phosphorous Trichalcogenides group, which possess unique physical properties, stands out. In the list of these crystals, we can meet ferroelectrics, antiferroelectrics, ferromagnetics, ionic conductors, semiconductors, dielectrics, and others. Of particular interest are CuInP₂S₆ crystals, which below the Curie temperature $T < T_C = 315\text{K}$ are ferrielectrics with spontaneous polarization $P_S = 3 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ directed perpendicularly to the structural layers. The coercivity field of these crystals is 77 kV/cm. Moreover, unlike most ferroelectrics, the ferrielectric properties of CuInP₂S₆ crystals are preserved even at thicknesses of units of nanometers (for example, Sn₂P₂S₆ crystals cease to exhibit ferroelectric properties at a size of less than 50 microns), which makes it very promising for use in modern electronics. It has already been used to create major electronic components such as diodes, transistors, ferroelectric transistors with negative capacitance, memory cells, and others.

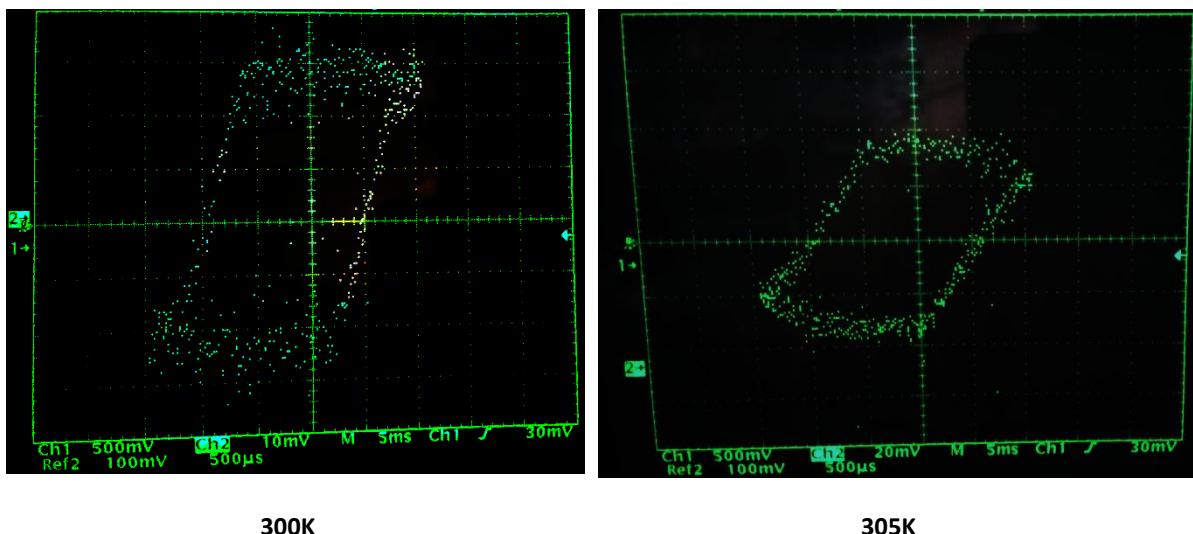


Fig. 1. Temperature evolution of dielectric hysteresis loops of CuInP₂S₆ crystal.

The last two applications are closely related to the phenomenon of switching spontaneous polarization under the action of an external electric field, so studying this phenomenon is an urgent task. In the available works, switching phenomena were mainly studied on a microscopic scale, using force microscopy technology. The data on macroscopic parameters of CuInP₂S₆ crystals (spontaneous polarization, its temperature behavior, the presence of

shifting electric fields, and the magnitude of the coercive field) are very few, so we carried out studies of the switching processes of spontaneous polarization on samples of relatively large size.

A CuInP₂S₆ crystal obtained from the gas phase, 20 μm thick, 5x5 mm² with gold electrodes sputtered in a vacuum with an area of 2x2 mm², was chosen for our studies. The remaining part of the crystal surface served as an additional protection against surface breakdown. Based on the crystal thickness and the coercive field value of $7.7 \cdot 10^6 \text{ V/m}^2 \cdot 10^{-5} \text{ m} = 154 \text{ V}$, we used a high-voltage amplifier with an output voltage of $\pm 160 \text{ V}$ (Operational Amplifier Burr-Brown 3584). To investigate the switching processes, we used a standard Sawyer-Tower scheme. The frequency of the measurement field was 100 Hz (copper ions did not have time to migrate through the sample thickness). The waveform was triangular and bipolar. The crystal was first annealed at 400K for three hours without applying an electric field to clean the sample from moisture and intercalating impurities before measurements. CuInP₂S₆ was then cooled to room temperature, and further dielectric hysteresis loop measurements were performed in the heating regime from 290K to 370 K. The resulting dielectric hysteresis loops are shown in Figure 1.

Ambient single frequency PFM and band excitation imaging/polarization switching were performed on a Bruker Dimension Icon AFM provided by Bruker Nano Inc. Pt-Ir coated SCM-PIT cantilevers have been used for all imaging modes. The resulting switching loops are shown in Fig. 2.

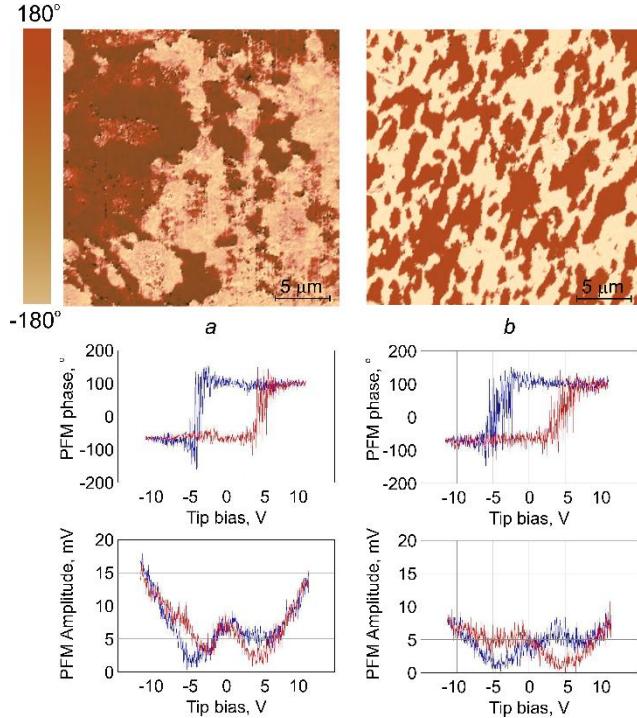


Fig. 2. Microscopic PFM polarization switching loops of the CuInP₂S₆ crystals obtained by the Bridgeman method – *a*, and from the gas phase – *b*.

As we can observe in Fig. 1 and 2 the polarization switching loops are significantly different for macroscopic and microscopic measurement modes.

Технологія отримання та оптичні властивості плівок PbTe, PbSe, PbS/ p-Si(100)

С.М. Левицький

Інститут фізики напівпровідників ім. В.С.Лашкарьова НАН України
03028 м. Київ, проспект Науки, 41, levytskyi@ua.fm

Вузькощілинні напівпровідникові сполук $A^{IV}B^{VI}$ є базовими термоелектричними матеріалами в області температур (300-950 К), перспективними матеріалами у напівпровідників оптоелектроніці для створення інжекційних лазерів і фотоприймачів для інфрачервоної області спектру, тому доцільне їх дальніше дослідження.

Плівки халькогенідів свинцю (PbTe, PbSe, PbS) були отримані з парової фази методом термічного напилення на вакуумній установці ВУП-5. В якості основної наважки використовувались попередньо синтезовані кристали. Підкладками був використаний монокристалічний кремній p-Si(100) з питомим опором $2 \div 10$ Ом·см (p-Si(100) є базовим матеріалом для виготовлення сонячних елементів, сенсорів тиску і т.д.). Температура підкладок в процесі росту плівок контролювалась і досягала значень $573 \div 623$ K. Товщина отриманих плівок контролювалась за допомогою інтерферометра і становила 0,8 – 1,0 мкм.

В даній роботі приведенні морфологічні та оптичні (відбивання в діапазоні 400 – 750 нм, еліпсометричні виміри на довжині хвилі $\lambda = 632,8$ нм, при куті падіння світла 70° , пропускання у діапазоні 2 – 25 мкм) дослідження плівок PbTe, PbSe, PbS /p-Si(100).

Морфологічні дослідження показали, що поверхня плівок PbTe, PbSe, PbS на p-Si(100) складається із частинок з чіткою кристалічною огранкою, в основному кубічної симетрії. Отримані плівки виявились не тільки полікристалічними, але і текстурізованими. Відрізняються вони ступенем розвиненості поверхні (аналіз шорсткості) та розмірами блоків.

Із кількісного аналізу спектрів відбивання системи плівка-підкладка (PbTe, PbSe, PbS /p-Si(100)) (дифракційний гратковий монохроматор МДР-23) оцінено показник заломлення плівок п. Отриманні значення показників заломлення плівок порівнюються із значеннями показників заломлення, отриманих за допомогою еліпсометричних вимірювань (еліпсометр ЛЭФ-3М).

Спектри пропускання даних систем (дифракційний гратковий

інфрачервоний спектрофотометр ІКС-29) дали змогу проаналізувати особливості інфрачервоної області спектрів підкладок і плівок PbTe, PbSe, PbS, а також оцінено показник заломлення n плівок.

Таким чином, проведені дослідження показали, що отриманні плівки по своїм оптичним параметрам не відрізняються від параметрів для об'ємних кристалів PbTe, PbSe, PbS і що в отриманих плівках механічні напруження релаксовані при даних товщинах плівок (постійні граток підкладки і плівок відрізняються).

Influence of gaseous adsorbate on optical properties of phosphor suspension based on YAG:Ce³⁺ microcrystals in epoxy resin matrix

Minakova, I.E.; Kamuz, O.M.; Khmil, D.M.; Kretulis, V.S.; Tytarenko, P.O.; Snopok, B.A.

V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 41 Pr. Nauki, 03028 Kyiv, Ukraine

In the process of manufacturing film luminophores based on YAG:Ce³⁺ in epoxy resin matrix [1], air interlayers usually appear at the boundary of microcrystals and resin. The main factors of that unwanted adsorbed layer formation can be:

- poor wetting of the phosphor microcrystals by the epoxy resin;
- entrapment of gases into the bulk from the air during mixing and application of the suspension;
- uneven distribution of phosphor particles in the epoxy matrix volume;
- defects during curing (resin shrinkage);
- outgassing during polymerization of the epoxy resin.

The thickness of the gaseous layer can range from units of nm to fractions of microns and depends on the technology of suspension production as well as on the properties of the resin and phosphor (especially on the size of microcrystals). The gaseous adsorbate layer affects the reflection at additional interfaces (epoxy resin matrix – gaseous layer - phosphor microcrystals), increasing the loss of "pump light" and reducing the luminescence efficiency.

To evaluate the effect of the gaseous adsorbate layer on the R_{ef} reflection coefficient, the case (see Fig.1) of light incident at a wavelength of 462 nm on a structure composed of epoxy resin, gaseous interlayer and YAG-Ce³⁺ crystal (with corresponding refractive indices n) on the epoxy resin side (*a*) and on the crystal side (*b*) was investigated.

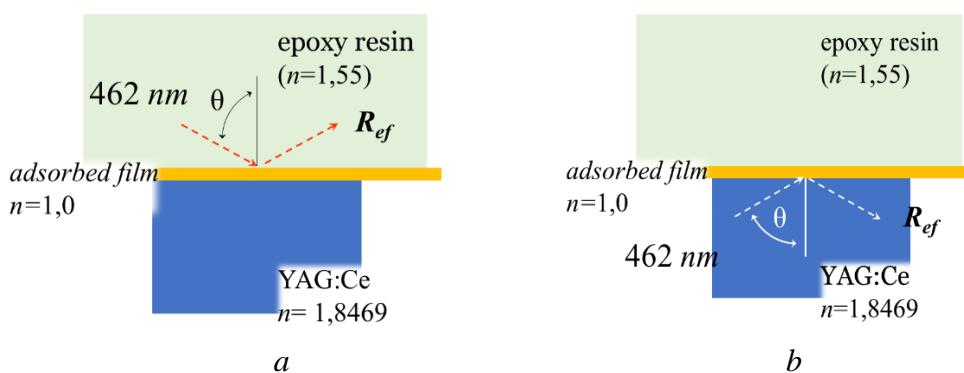


Fig.1. Schematic representation of the system to be modelled

The calculation of the angular dependence of the reflection coefficient for the structures shown in Fig. 1 at the thickness of the gas layer (0÷10) nm was performed using the WinSpall 3.02 software by numerically solving the Fresnel equations for the plane-parallel layered structure given in Fig. 1. The

results are shown in Fig. 2a (for the case of Fig. 1a) and Fig. 2b (for the case of Fig. 1b).

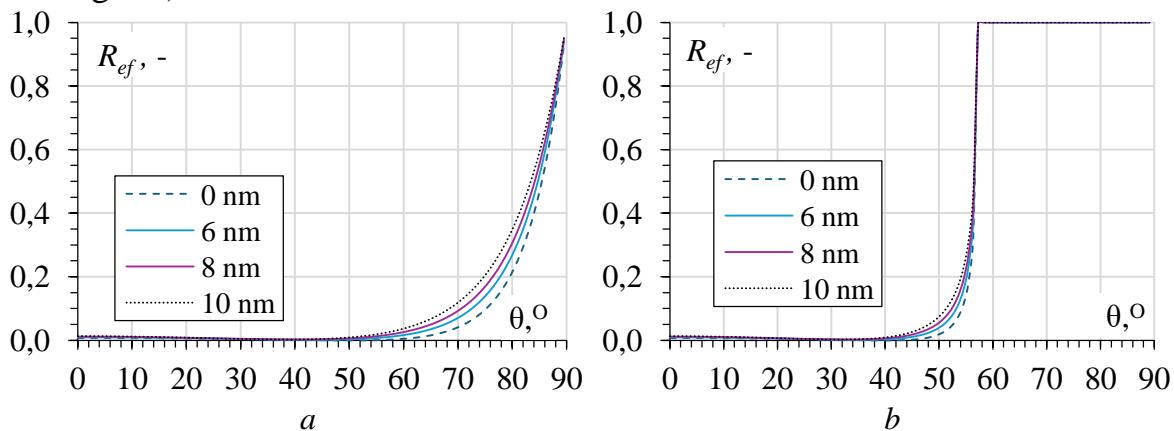


Fig.2. Reflection coefficient as a function of the angle θ for the structures shown in Fig. 1

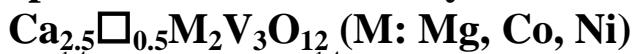
From the data in Fig. 2, it can be seen that the reflection coefficient in the structure of resin - gaseous adsorbate film - crystal increases with the film thickness and is most pronounced at the angle of incidence of the radiation around $\sim 77^\circ$. R_{ef} increases by 80% compared to the case of a film with zero thickness. For the case of crystal - film adsorbate - resin structure, the maximum effect is observed at $\sim 54^\circ$, R_{ef} increases by 120%. The total losses due to reflection at both the resin-gas and gas-crystal interfaces in the undegassed suspension increase by about 200%. At the same time, at normal incidence and up to 50° (structure Fig.1a) and up to 40° (structure Fig.1b), R_{ef} is practically independent of the presence of the gas film in the investigated thickness range, the reflection losses are within 1%. In the considered structure the effect of light trapping inside the crystal is observed: the value of the critical angle θ_c for light incident from the crystal side (Fig.2b) is about 57° , at larger angles the complete internal reflection is observed. The value of θ_c corresponds to the value for the crystal-resin interface $\theta_c = \arcsin(n_2/n_1) = \arcsin(1.55/1.85)$, i.e. the influence of the gas layer on this parameter is negligible.

Finally, the following conclusion is clear: the presence of the adsorbed gas film can lead to a significant increase in R_{ef} in the specified angular range for the considered structures. To minimize such defects, the manufacturing technology of film phosphors should include vacuum degassing prior to curing, as well as optimization of resin viscosity and curing rate [2].

1. Denys N. Khmil, Irina E. Minakova, Vladimir S. Kretulis, Pavlo O. Tytarenko, Oleksandr M. Kamuz and Borys A. Snopok Optical detection of cerium (Ce^{3+}/Ce^{4+}) ions in microparticles of yttrium aluminum garnet powder YAG:Ce³⁺ embedded free-standing composite films for narrowband blue to broadband visible light down-conversion., *Eng. Proc.* 2024, **82(1)**, 81. <https://doi.org/10.3390/ecsat-11-20356>

2. F.L. Jine et al. Synthesis and application of epoxy resins: A review., *J. Ind. Eng. Chem.* 2015, **29**, 1-11. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2015.03.026>

Dielectric properties and conductivity of vanadate ceramics



Rada Savkina^{1,4}, Oleksii Smirnov^{1,4}, Aleksandra Wypych-Puszkarz²,
H.S. Rahimi Mosafer³, and Wojciech Paszkowicz³

¹*V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics at NASU, 03028 Kyiv, Ukraine*

²*Lodz University of Technology, 90-924 Lodz, Poland*

³*Institute of Physics PAS, 02-668 Warsaw, Poland*

⁴*National University "Kyiv-Mohyla Academy", 04070 Kyiv, Ukraine*

Alkali and alkaline earth vanadates such as $\text{A}_3\text{M}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$ (A : Ca, Sr, Ba) and $\text{A}_2\text{BM}_2\text{C}_3\text{Z}_{12}$ (B : Li, Na, K, Cs), M - divalent metal ions, are members of a large family of garnets, the diverse properties of which are being studied very actively. These compounds can be used in the field of solid-state lighting – as phosphors that do not contain rare earth elements. Low synthesis and sintering temperatures (about 900°C) make them a suitable material in the technology of low-temperature co-fired ceramics. A modern trend is the development of compounds with a garnet structure containing vanadium, with dielectric properties suitable in the microwave range. At the same time, ionic transport study for calcium-containing vanadate garnets is not exhaustive. This motivated us to study conductivity and dielectric properties of $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{M}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$ (M : Mg, Co, Ni) compounds.

The conventional solid-state method was used to prepare $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{M}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$ (M : Mg, Co, Ni) in air at 900°C. Rietveld refinements for the powder X-ray diffraction patterns confirmed the formation of a cubic garnet-like structure (space group *Ia3d*). Scanning electron microscopy revealed the grain structure connected into large clusters with voids between them. The grain morphology was regular in shape but was found to be non-uniform in size (1÷7 μm). Complex method of the impedance spectroscopy was applied to study the electrical processes occurring in a ceramic structure on application of an ac signal. The dielectric properties (dielectric constants and loss tangent) as well as and electrical conductivity and modulus of vanadium-based defect garnets ($\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{M}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$, M: Ni, Mg, Co) were systematically investigated using a Novocontrol GmbH Concept 40 broadband dielectric spectrometer as a function of temperature (-50÷250°C) and frequency ($10^{-1} \div 10^7$ Hz).

A negative temperature coefficient of ($\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{M}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$, M: Ni, Mg, Co) resistance was found for all ceramics under investigation, confirming the behavior similar to the semiconductor materials. The activation energy of the conduction process was determined to be 0.6 eV for $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{Mg}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$ and 0.46 eV for $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{Co}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$ ceramic. For $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{Ni}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$ ceramics, two slopes have been observed on $\sigma(T)$ at low (from 80°C to 150°C) and high temperatures (from 150°C to 250°C) with activation energies - 1.04 eV and 1.78 eV respectively. The frequency dependence of the electrical conductivity

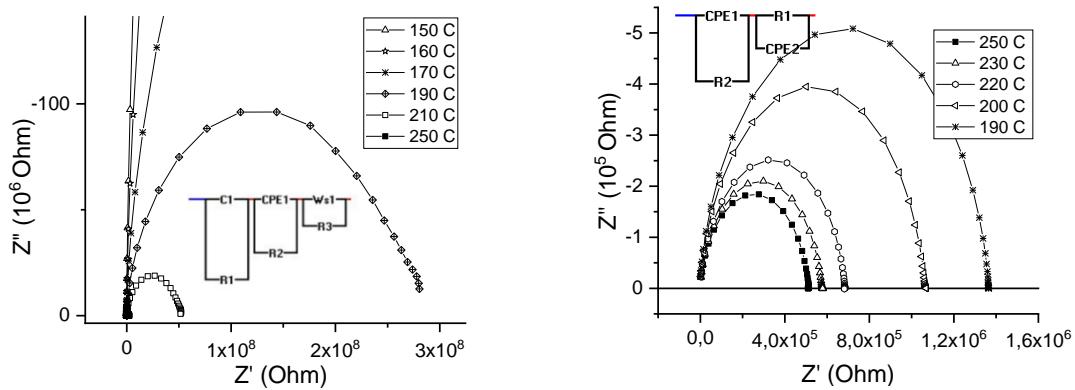


Figure 1. Complex impedance (Nyquist) experimental and fitted plot for $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{Ni}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$ (a) and $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{Co}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$ (b) ceramics at different temperatures.

is identified as fingerprints of a non-random hopping conductivity in the frame of the jump relaxation model.

In order to extract the characteristic parameters of different conductivity canal contributions existing in materials investigated, the impedance spectrum (Z'' vs Z' , Nyquist plots) were fitted, using EISa software (see Fig.1). For $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{M}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$, (M : Mg, Co), the impedance spectrum was fitted by an equivalent circuit composed from the two parallel (R-CPE) elements connected in series. Impedance spectra show semicircle arcs corresponded to the grain + graine boundaries conductivity process. CPE (a constant phase element) is adopted to admit the non-ideality of the system due to the relaxation times dispersion. For $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{Ni}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$ ceramics, an additional element appears when modelling an electrical circuit, indicating a finite-length diffusion with transmissive boundary.

The value of the dielectric constant of the studied materials at room temperature and $f = 1$ MHz was determined to be 9.65, 15.6 and 20 for Mg-, Ni- and Co-containing ceramic respectively. At 1 kHz and at room temperature (20°C), the $\tan(\delta)$ reaches a value of 0.0018 for $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{Ni}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$, 0.0012 for $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{Mg}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$, which is lower than that of $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{Co}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$ (~ 0.13). It should be emphasized that the dielectric loss $\tan(\delta)$, i.e. the ability of ceramics to dissipate electrical energy, is two orders of magnitude higher in materials with the Co addition than in Ni- and Mg-containing ceramics. At the same time, the ability to polarize (or hold charge) in the studied ceramics (i.e. permittivity), according to the literature data found, is approximately the same and is at the level of 10. Although for our samples, the dielectric constant is greater for nickel (15.6) and cobalt (20) containing ceramics.

Obtained findings reveal the potential of the calcium-containing vanadate garnets $\text{Ca}_{2.5}\square_{0.5}\text{M}_2\text{V}_3\text{O}_{12}$, (M : Mg, Co, Ni) as material with low dielectric loss and stable ability to hold charge at room temperature. Further tailoring of these ceramics is still needed for achieving higher ionic conductivity and using as electrode materials in calcium ion batteries.

Structural studies of $\text{As}_2\text{S}_3:\text{Zn}$ glasses

Kochubei H.¹, Stronski A.¹, Dzhagan V.¹, Shportko K.¹, Selyshchev O.², Shamrovska P.², Zahn D.R.T.²

2- *V.Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics NAS Ukraine, Kyiv, Ukraine*

2-Semiconductor Physics and MAIN, Chemnitz University of Technology, Chemnitz, Germany

kochubei.hanna@gmail.com

Chalcogenide glasses can be used in various photonics applications: IR optics, sensorics, optoelectronics, holography, integrated and fibre optics, both for passive and active applications. Optical, luminescent, electrical, thermophysical, mechanical, and magnetic properties of chalcogenide glasses can be changed by doping with different elements (optically active rare-earth and transition metal ions, etc.) [1], and this area is of special interest and numerous studies. The present work was devoted to studies of the influence of Zn doping on structural properties of As_2S_3 chalcogenide glasses by X-ray diffraction and Raman spectroscopy.

Glasses were prepared by the conventional melt quenching technique. The prepared bulk glasses $\text{As}_2\text{S}_3:\text{Zn}$ composition, were controlled using EDX. X-ray diffraction (XRD) patterns of the samples were recorded with a Rigaku SmartLab® X-ray diffractometer, using Cu Ka radiation source with $\lambda = 1.5406\text{\AA}$. The diffraction data were collected in the range of the 2Θ angles between 2° and 120° , with a 0.05° step. Results confirm the amorphous nature of the bulk samples of the studied chalcogenide glasses. The obtained diffraction data (the program RAD GTK+ was used) were used to calculate radial distribution functions and short-range order parameters. Bond angle φ values were calculated using the obtained positions of the nearest-neighbour bond length r_1 and second-neighbour bond length r_2 in relation: $\varphi = 2 \cdot \arcsin(r_2/2r_1)$.

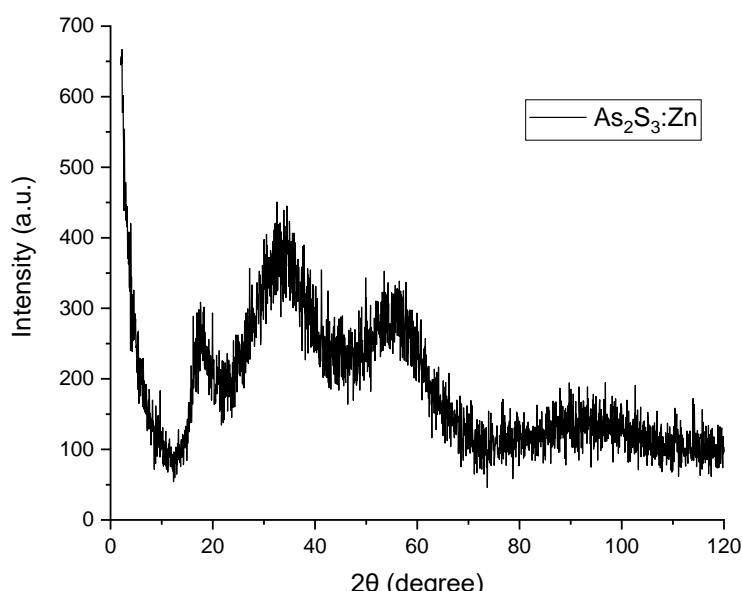


Fig.1. Diffraction pattern of $\text{As}_2\text{S}_3:\text{Zn}$ glass.

Table 1. Radial distribution functions and short range order parameters

Composition	r_1	r_2	r_2/r_1	Φ
As_2S_3	2.31	3.35	1.45	92.96
$As_2S_3:Zn$	2.31	3.48	1.51	98.23

Raman spectra were acquired with a LabRAM HR setup from HORIBA Scientific. Measurements were performed in a backscattering geometry at room temperature using a $\lambda = 514.7$ nm laser with a power of 70 μW , focused through 50x objective for excitation. The measurement range was from 50 to 1500 cm^{-1} , with a resolution of 1 cm^{-1} and an accumulation time of 120 s. The obtained Raman spectra were analysed using CoRa software [2]. Observed bands in the Raman spectra of $As_2S_3:Zn$ alloys show that such glasses contain different nanophases and can be explained in terms of vibrational modes of As-S glasses known from literature data.

ACKNOWLEDGEMENTS *H.Kochubei has the pleasure to acknowledge support by project DAAD №57703089. The work was partially supported by the priority research programmes of NAS of Ukraine (0125U000799)*

1. A.Stronski, O. Paiuk, A. Gudymenko, et.al. Ceramics International, 41, I.6, (2015), 7543-7548.
2. K. Shportko, R. Ruekamp, and H. Klym, CoRa: An Innovative Software for Raman Spectroscopy, *J. Nano- Electron. Phys.*, vol. 7, pp.1-4 (2015)

Вплив атмосфери на чутливість детектування у лазерних далекомірних системах

В.О. Гринь, С.М. Левицький, В.В. Таранов, В.В. Мінаков

*Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України
03028 м. Київ, проспект Науки, 41, levytskyi@ua.fm*

Лазерні далекомірні системи дозволяють швидко і точно провести вимірювання відстані, уловлюючи відбиті від поверхні лазерне випромінювання. Проте при роботі на далекі дистанції (1 км і далі) їх можливості обмежуються, зокрема, станом атмосфери. Атмосфера має значний вплив на лазерне випромінювання, зокрема на його інтенсивність, напрямок і спектральні характеристики. Вплив залежить від багатьох факторів, таких як довжина хвилі лазера, погодні умови, тип атмосфери, наявність забруднень та інші параметри. Розуміння того як залежить дальність детектування від параметрів атмосфери дозволить проектувати системи із необхідними характеристиками.

У старій літературі на цю тему як формули, так і коефіцієнти мають спотворення. Так, наприклад, у [1] у двох сусідніх параграфах одна і та сама величина позначається різними літерами, а розрахунок за наведеними формулами дає нереальні значення цієї величини. Тому для розрахунку лазерних систем потрібно отримати коректні формули, які задовільнятимуть реальним умовам експерименту.

Основні джерела для детектування відстані це ІЧ лазери із довжинами хвиль близько 1 мкм. У цьому спектральному діапазоні найбільший вплив на поглинання і розсіювання чинить наявна в атмосфері вода [2]. Оцінити прозорість атмосфери для інфрачервоного випромінювання, враховуючи поглинання водяної пари, можна за допомогою формули Ельдера-Стронга. Вона є емпіричною і залежить від кількості водяної пари (W) і спектрального діапазону. Формула Ельдера-Стронга була вперше представлена в статті Elder, T.; Strong, J. The infrared transmission of atmospheric windows, 1953, опублікованій у Journal of the Franklin Institute [3]. Один із варіантів її запису

$$T_{\text{abs}} = Ae^{-BW} + Ce^{-DW},$$

де W – кількість водяної пари, а A, B, C, D — константи для різних спектральних діапазонів. Константи наведено в сучасних джерелах, таких як [4], хоча оригінальна робота Ельдера та Стронга (1953) теж є у доступі.

Є і більш точні моделі обчислень, ніж формула Ельдера-Стронга, але вони обчислювально складніші. У [4] згадуються MODTRAN, 6S/6SV1, LBLRTM. Наприклад, MODTRAN моделює поглинання та розсіювання з роздільною здатністю 1 см^{-1} , але вимагає значних ресурсів. Більші обчислювальні ресурси вимагають як потужного джерела живлення, так і більшого простору для електронних компонентів, що є недоліком, якщо потрібна компактна портативна система.

Формула Ельдера-Стронга є спрощеною моделлю, яка не враховує нелінійні ефекти, такі як атмосферна турбулентність чи термічне розширення, але є ефективним інструментом для оцінки атмосферної прозорості в інфрачервоному діапазоні, особливо для застосувань, де водяна пара є основним фактором поглинання. Програма на Python забезпечує простий спосіб її реалізації, дозволяючи користувачам швидко обчислити пропускання для різних умов. Це дозволяє зрозуміти як атмосферні умови впливають на проходження лазерного випромінювання. Знання цих впливів необхідне для коректного налаштування лазерних систем, особливо для довгих дистанційних вимірювань або лазерного зв'язку, де точність та стабільність променя мають критичне значення.

1. Источники и приемники излучения: Уч. пос. для студентов оптических специальностей вузов / Г. Г. Ишанин, Э. Д. Панков, А. Л. Андреев, Г. В. Политиков — СПб.: Политехника, 1991. — 240 с.
2. Справочник по инфракрасной технике. / Ред. У. Вольф, Г. Цисис. В 4-х т. Т. 1. физика ИК-излучения: Пер. с англ. – М. : Мир, 1995. – 606 с.
3. T. Elder, J. Strong The infrared transmission of atmospheric windows, Journal of the Franklin Institute, Volume 255, Issue 3, 1953, Pages 189-208, [https://doi.org/10.1016/0016-0032\(53\)90002-7](https://doi.org/10.1016/0016-0032(53)90002-7).
4. Fahey, T.; Islam, M.; Gardi, A.; Sabatini, R. Laser Beam Atmospheric Propagation Modelling for Aerospace LIDAR Applications. *Atmosphere* **2021**, *12*, 918. <https://doi.org/10.3390/atmos12070918>

Synthesis and Characterization of $\text{TiO}_2/\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ and $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{WO}_3$ Nanostructures for Energy Storage Devices

Rada Savkina^{1,2}, and Oleksii Smirnov^{1,2}

¹V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics at NASU, 03028 Kyiv, Ukraine

²National University “Kyiv-Mohyla Academy”, 04070 Kyiv, Ukraine

The development of renewable and reliable energy storage devices with features of environmental friendliness and low cost is very relevant. High power density, excellent cycle stability, and fast charge/discharge process make supercapacitors a promising energy device. However, the energy density of supercapacitors is still lower than that of conventional batteries. As is known, the supercapacitors properties largely depend on the materials of the electrodes. The development of inexpensive electrode materials with advantageous electrochemical properties is still a great challenge. To overcome these problems, much attention is paid to the fabrication of metal oxide nanostructures and their modification by various approaches, such as doping, introduction of oxygen vacancies, and hybridization with carbon allotrope nanomaterials and polymers to improve electrochemical properties.

Transition metal oxides are extensively studied in supercapacitor research due to their ability to undergo fast and reversible redox reactions at the electrode–electrolyte interface, resulting in improved energy storage. Among them, $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (hematite) is considered a promising candidate for the negative electrode because of its broad working voltage window (-1.2 V to $+0.25$ V), strong redox activity ($\text{Fe}^{3+}\rightleftharpoons\text{Fe}^{2+}$), economic advantages, and natural abundance. Nevertheless, its practical use is hindered by intrinsic limitations such as low electrical conductivity and high recombination rates of charge carriers, which are mainly caused by sluggish transport kinetics. Several techniques have been proposed to address these drawbacks, including doping with conductive elements, morphological optimization, and the creation of composite or hybrid architectures—e.g., $\text{TiO}_2/\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ or $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{WO}_3$ systems. Our research focuses on the latter approach.

We synthesized $\text{TiO}_2/\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ and $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{WO}_3$ nanocomposites using an ultrasonic-assisted method, combining commercial WO_3 and TiO_2 nanopowders with Fe_2O_3 nanoparticles derived from $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ (Aldrich, 98%). The synthesis involved heating a solution of iron nitrate and monohydrated citric acid ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 \cdot \text{H}_2\text{O}$) under vigorous stirring at 70 °C until gel formation occurred after water evaporation. The obtained gel was then thermally treated at 400 °C to yield Fe_2O_3 nanoparticles. The crystalline structure of synthesized $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ nanopowder and iron oxide-based composites were characterized by X-ray diffraction method, SEM microscopy (Tescan Mira 3 LMU) and diffuse reflectance spectroscopy. X’Pert Pro Alpha1 diffractometer with Bragg-Brentano geometry ($\text{CuK}_{\alpha 1}$ radiation, 1.540598 Å wavelength), working in continuous scanning mode, equipped

with a strip detector. The optical absorption spectra were calculated from the diffuse reflectance spectra using the Kubelka-Munk theory. The diffuse reflectance spectra were recorded by using a two-beam spectrophotometer Shimadzu UV-3600.

It was observed that Fe_2O_3 nanoparticle morphology and size were strongly influenced by synthesis parameters. Optimal fabrication conditions were identified, particularly the use of ultrasound, which significantly reduced the particle size from approximately 30 nm to \sim 15 nm. SEM analysis confirmed uniform distribution of Fe_2O_3 particles (15–16 nm) on the surface of WO_3 , as well as their deposition into the pores of the TiO_2 matrix. Furthermore, incorporating varying amounts of Fe_2O_3 into the TiO_2 framework led to a noticeable reduction in band gap energy, enabling photocatalytic activity under visible light conditions. The considered dual-absorber photoanode architecture demonstrates significant potential, effectively integrating the complementary advantages of each component to achieve significantly improved performance of the final device.

Laser reduction and maskless laser lithography of Graphene Oxide films on dielectric

A.N. Nazarov^{1,2}, P.V. Lytvyn¹, A.A. Korchovyy¹, V.V. Strelchuk¹, A.S. Nikolenko¹, O.M. Slobodyan¹, S.I. Tyagulskiy³, V.M. Dzhagan¹

¹⁾*Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

²⁾*National Technical University "Igor Sikorsky KPI", Kyiv, Ukraine*

³⁾*Institute of Photonics and Electronics CAS, Praha, Czech Republic*

Graphene oxide (GrO) is very promising 2D material that is widely used to form effective catalysts, chemical and biosensors, supercapacitors and solar cells. In most cases graphene oxide performs reduction to form physical properties close to graphene. Though electrical resistance of graphene oxide decreases easily with annealing temperature (10^7 times with increase of temperature from 100 to 200°C) [1] but complete loss of oxygen bonds in graphene structure demands temperature more than 500°C in vacuum or very long chemical treatment. The formation of simple graphene based electronic devices demands special photoresist and such chemicals as acetone. Using laser treatment of the graphene oxide allows us to solve both tasks – to perform maskless lithography (without using the chemicals) and effective reduction of the material.

To form CMOS compatible graphene device the graphene oxide water solution was deposited on SiO₂/Si structure by drop casting method with following heating at 50°C for 1 hour. For reduction of the GrO film and it scribing the laser with wavelength of 455 ±5nm and power of 5W (Model CR -Laser Falcon Laser) was used. For reduction of the GrO film the power from 0.150 W to 0.275 W was employed, for scribing of the GrO film on SiO₂ the power more than in factor 10 was used. Obtained structures are shown in figure 1.

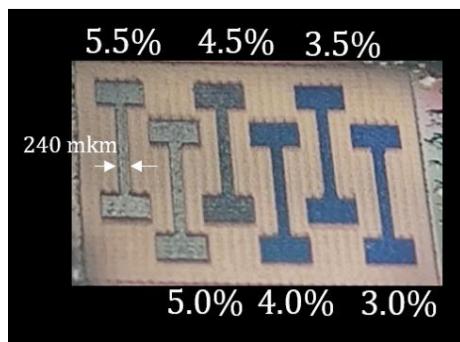


Figure 1. Photo of the GrO strips formed by laser scribing.

Analysis of electrical resistance, surface morphology and structure of the laser reduced strips and comparison with thermal annealing in air at 230C for 15 minutes using correspondingly I-V characteristics, AFM microscopy and Raman spectroscopy was performed. It was shown that resistance of GrO strip at optimal laser reduction is considerably less than in the case of the thermal

annealing. Raman spectra show (Fig. 2) that at optimal regime of laser treatment three narrow lines corresponding to D-line at 1351.3 cm^{-1} , G-line at 1587.6 cm^{-1} and 2D-line at 2700.8 cm^{-1} were formed, that is similar to defect graphene structure. Comparison of amplitudes relation D to G-lines and D- to 2D-lines attests better graphene structure in case of laser reduction of the GrO in compared with thermal reduction at 230°C for 15 minutes. In the same time surface morphology measured by AFM microscopy method testified that laser treatment forms the graphene surface with more roughness than in case of thermal annealing in air (see Fig.3). Such graphene surface can be useful for using the structures for bio- and chemical sensors.

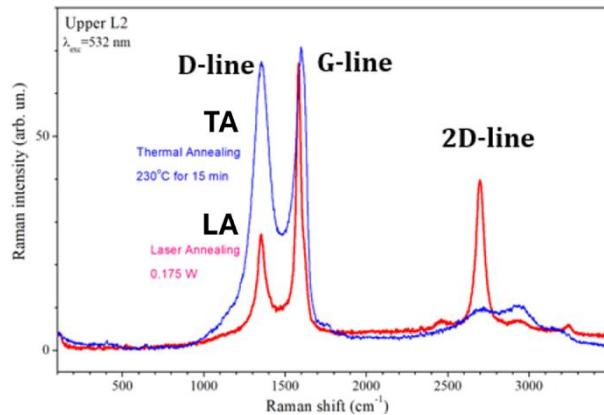


Figure 1. Raman spectra of the GrO films after laser annealing at optimal treatment regime (LA) and thermal annealing at 230°C for 15 minutes (TA).

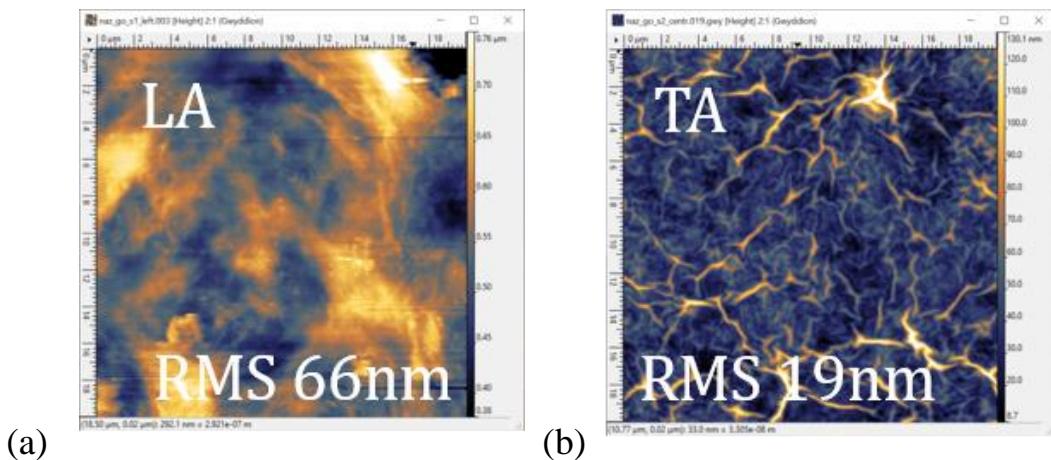


Figure 1. Surface morphology of reduced GrO measured by AFM technique for laser annealing (a) and thermal annealing (b).

Acknowledgments. The research was supported by the National Research Foundation of Ukraine (project №2023.05/0022).

ДОСЛІДЖЕННЯ ГАЗОЧУТЛИВИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНО- ТА МІКРОРОЗМІРНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ZnO

Коваленко О.В., Ляшков О.Ю., Воровський В.Ю.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,
пр. Науки, 72, м. Дніпро, 49045, Україна

Метало-оксидні напівпровідники широко використовуються як високоефективні датчики газу з низькою собівартістю. Такі датчики знаходять застосування в хімічній та гірничодобувній промисловості, при моніторингу якості повітря. Цьому напряму приділяється все більше уваги через погіршення навколошнього середовища в багатьох країнах та зростання об'ємів промислового виробництва. Метало-оксидні напівпровідникові датчики компонентів газового середовища мають високу швидкість реагування, що робить їх перспективними для великих мереж для моніторингу якості повітря. Однак, недоліком таких датчиків є низька селективність і високі значення робочих температур $T = 300-400^{\circ}\text{C}$. Покращення властивостей сенсорів неможливе без детального вивчення процесів, які відбуваються в таких структурах за різних умов складу газового середовища.

Основною метою роботи було дослідження електричних властивостей нано- та мікророзмірних метало-оксидних напівпровідниковых структур у вакуумі та в атмосфері різних газів.

Для експериментальних досліджень використовували порошки нанокристалів $\text{ZnO}:Mn$ та $\text{ZnO}:Ag$ кераміку з мікророзмірними кристалами. Нанокристали у вигляді нанопорошків синтезували з розчинів нітрату цинку ($\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \times 6\text{H}_2\text{O}$) та нітрату марганцю ($\text{Mn}(\text{NO}_3)_2 \times 6\text{H}_2\text{O}$) методом ультразвукового піролізу аерозолю. Вміст Mn не перевищував 2 ат. %. Синтезований порошок піддавали термічній обробці у водні при температурі $T = 550^{\circ}\text{C}$ в суміші газів аргону та водню ($\text{H}_2:\text{Ar} = 1:3$) протягом 20 хв. Порошок охолоджували протягом 15 хв. у потоці аргону. З отриманого матеріалу методом пресування при $P = 140 \text{ MPa}$ виготовляли диски діаметром 5 мм і товщиною 1-1,5 мм.

Мікророзмірні порошки отримували шляхом додавання необхідної кількості розчину AgNO_3 до колоїдного водного розчину порошку ZnO . Під час реакції відбулося рівномірне осадження оксиду срібла на кристалах ZnO . З отриманого осаду після висушування шихти методом формування під тиском $P = 100 \text{ MPa}$ отримували диски діаметром 12 мм і товщиною 2-3 мм. Легування сріблом кристалів ZnO відбувалося під час відпалу отриманих дисків на повітрі при температурі $T = 900^{\circ}\text{C}$ протягом 1 год.

Нанорозмірний порошок складався зі сферичних гранул діаметром 2-3 мкм. Дані рентгенофазового аналізу показали, що гранули

складаються з агломератів наночастинок розміром близько 30 нм.

Аналіз мікроструктури зразків кераміки системи ZnO:Ag показав, що матеріал усіх зразків мав полікристалічну структуру. Середній розмір кристалітів становив 0,2-0,5 мкм.

Незважаючи на різні технологічні умови виготовлення та різний склад, у структурі нанокристалічного порошку ZnO:Mn і кераміки ZnO:Ag можна спостерігати такі спільні властивості:

1) в обох матеріалах розміри елементарних блоків, фрагментів гранул у ZnO:Mn і зерен у ZnO:Ag мають значення від десятих мікрон до одиниць мікрон;

2) в обох випадках створюється комірчаста структура, в яку добре проникають гази.

Для обох матеріалів спостерігаються слабко нелінійні вольт-амперні характеристики, що свідчить про існування міжзерennих потенційних бар'єрів, основну роль в утворенні яких на поверхні ZnO відіграє хемосорбований кисень. Для встановлення ролі кисню у формуванні газочутливих властивостей матеріалів на основі оксиду цинку були проведені експерименти з вивчення впливу вакууму та різних газових середовищ на їх електропровідність.

При відкачуванні повітря з вакуумної камери для нанокристалічного ZnO:Mn, який знаходився при температурі $T = 90^{\circ}\text{C}$, його опір в інтервалі часу до 300 с. збільшувався, а потім зменшувався. Такий характер зміни опору з часом можна пояснити процесом десорбції молекул води на початковому етапі, а далі десорбцією кисню з поверхні наноматеріалу. Напуск аргону після цього призводив до поступового зростання опору.

Відкачування повітря з вакуумної камери призводить для зростання провідності ZnO:Ag, що також можна пояснити десорбцією кисню і зниженням величини поверхневого потенціального бар'єру. Температура кераміки складала $T = 250^{\circ}\text{C}$. Напуск суміші пропану (C_3H_8) та бутану (C_4H_{10}) до вакуумної камери після цього призводить до швидкого зростання опору.

Видалення кисню з навколошньої атмосфери в результаті вакуумування і, відповідно, його десорбція з поверхні напівпровідників на основі оксидів металів дозволяє встановити механізми впливу конкретного газу на електропровідність матеріалу сенсора. Механізм взаємодії газів з поверхнею ZnO загальний як для нанорозмірних, так і для мікророзмірних матеріалів. Ступінь дисперсності матеріалу сенсора не впливає на характер взаємодії поверхні зерен ZnO з атмосферним повітрям. Кисень відіграє вирішальну роль у формуванні електропровідності та газочутливих властивостей матеріалів на основі оксиду цинку.

Спектри пропускання та параметри модифікованих ртуттю аморфних плівок $\text{Se}_{100-x}\text{As}_x$

Рубіш В.М.^{1,2}, Поп М.М.^{1,2}, Макар Л.І.¹, Трунов М.Л.¹, Пісак Р.П.¹

¹Інститут проблем реєстрації інформації НАН України, Ужгород, Україна
center.uzh@gmail.com

² Ужгородський національний університет, Ужгород, Україна

В даній роботі наведені результати досліджень спектрів пропускання номінально чистих і витриманих в парах ртуті аморфних плівок $\text{Se}_{100-x}\text{As}_x$ ($x=0, 3, 5, 7, 9$).

Аморфні плівки системи Se-As з вмістом миш'яку 0, 3, 5, 7 і 9 ат.% одержували методом вакуумного випаровування стекол відповідних складів із квазізамкнутих ефузійних комірок на непідігрівані скляні підкладки. Товщина плівок складала ~ 1 мкм. Модифікування плівок $\text{Se}_{100-x}\text{As}_x$ здійснювалося в спеціальних герметичних контейнерах шляхом їх витримки в парах ртуті протягом тривалого часу (24-48 год.) при кімнатних температурах.

Дослідження спектрів пропускання плівок в області 450-1050 нм проводились при кімнатній температурі, з використанням дифракційного монохроматора МДР-3. Спектральне розділення складало не більше 10^{-3} еВ.

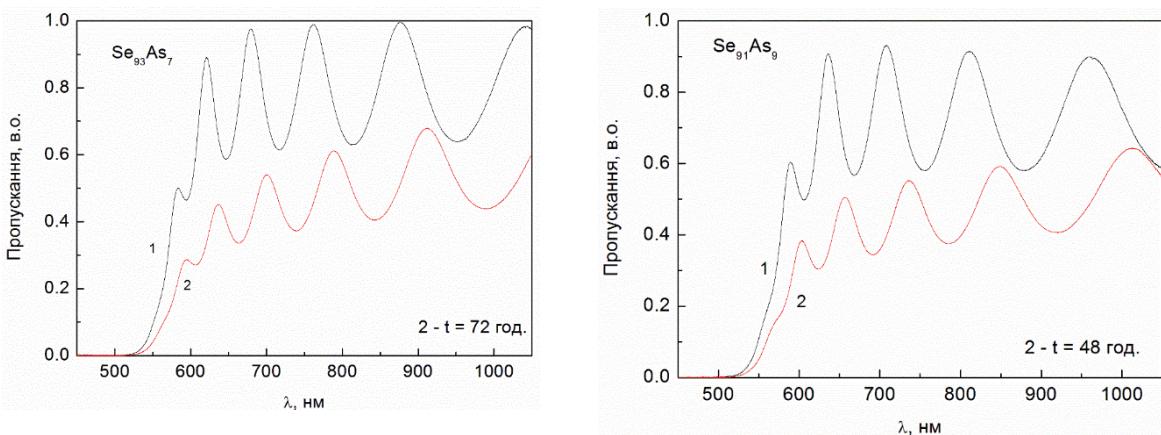


Рис. 1. Спектри пропускання номінально чистих (1) та модифікованих ртуттю протягом різного часу t (2-3) аморфних плівок системи Se-As

На рис. 1 наведені типові для всіх досліджених зразків спектри пропускання номінально чистих і модифікованих ртуттю плівок $\text{Se}_{100-x}\text{As}_x$ ($x=7, 9$). Для плівок з $x = 3$ і 5 спектри подібні. При зростанні вмісту As у складі номінально чистих плівок край поглинання дещо зміщується у довгохвильову ділянку спектру засвідчуючи зменшення їхньої ширини псевдозабороненої зони E_g . Зсувається край поглинання плівок і при їх модифікуванні ртуттю. При цьому, за рахунок значного

розсіювання і поглинання світла в приповерхневих шарах, суттєво зменшується пропускання плівок (рис. 1).

Величина E_g плівок визначалась із співвідношення Тауца [1]:

$$\alpha(hv) = \frac{B(hv - E_g)^2}{hv},$$

де $\alpha(hv)$ – коефіцієнт поглинання, hv – енергія фотона, B – константа, яка характеризує нахил тауцівського краю поглинання. Значення E_g номінально чистих плівок, визначені шляхом екстраполяції залежностей $[\alpha(hv) \cdot hv]^{1/2} \sim f(hv)$ до $\alpha(hv) = 0$, наведені в таблиці. Для модифікованих плівок значення ширини їх псевдозабороненої зони визначались аналогічним чином.

Таблиця. Значення E_g номінально чистих аморфних плівок $Se_{100-x}As_x$

Склад	Se	$Se_{97}As_3$	$Se_{95}As_5$	$Se_{93}As_7$	$Se_{91}As_9$
E_g , eВ	2,065	2,064	2,063	2,062	2,056

Для модифікованих плівок $Se_{100-x}As_x$ значення E_g дещо менші. Ширина псевдо забороненої зони аморфних плівок, витриманих в парах ртуті 24, 48 і 72 год. складає: Se (24 год.) – 2.060 eВ, Se (48 год.) – 2.049 eВ; $Se_{97}As_3$ (48 год.) – 2.003 eВ; $Se_{95}As_5$ (72 год.) – 1.938 eВ; $Se_{93}As_7$ (72 год.) – 2.024 eВ; $Se_{91}As_9$ (48 год.) – 2.019 eВ.

З порівняння значень E_g номінально чистих і модифікованих ртуттю аморфних плівок $Se_{100-x}As_x$ видно, що вони відрізняються в незначній мірі. Можливо це пов’язано з тим, що край поглинання селеніду ртуті, який сформувався в приповерхневих шарах плівок після їх витримки в парах ртуті, близький до краю поглинання номінально чистих плівок. Зазначимо, що край фундаментального поглинання плівки $HgSe$, одержаної гідрохімічним синтезом, складає 2.0 eВ [2].

Концентраційні залежності E_g модифікованих і не модифікованих аморфних плівок обговорюються з позиції їх атомної будови.

1. Tauc J., Menth A., States in the gap // Journal of Non-Crystalline Solids, 1972. – V. 8-10, – P.569-585.
2. Созанський М.А., Стаднік В.Є., Шаповал П.Й., Ятчишин Й.Й., Гладь Р.І. Гідрохімічний синтез плівок меркурій селеніду ($HgSe$) на скляних підкладках. // Мат. IV Всеукраїнської науково-практичної конференції молодих вчених та студентів «Фізика і хімія твердого тіла. Стан, досягнення і перспективи», Луцьк, 2016, с. – 73-74.

Detection of explosive analogue materials by SERS technique

N.V. Mazur, O.A. Kapush, O.F. Isaieva, P.V. Demydov, V.K. Lytvyn
V.M. Dzhagan, V.O. Yukhymchuk

V. Lashkaryov Institute of Semiconductors Physics, NAS of Ukraine, 03028 Kyiv, Ukraine
E-mail: nazarmazur@isp.kiev.ua

The development of technique for detecting explosive materials based on SERS (Surface-Enhanced Raman Spectroscopy) is of great relevance from the point of view of countering potential threats in the field of national and global security. The advantages of optical methods are their rapidity, no need for special preparation of material for analysis, short time for the analysis itself, they are nondestructive methods and the ability to carry out diagnostics of various dangerous substances outside the laboratory using portable device, which allows detecting small concentrations of materials. The SERS technique can be used to detect contamination in soils and water sources, including chemical substances that are components or decomposition products of various types of explosives that may threaten the environment and human health. Recent works [1-3] show that SERS may be a key method for explosives detection, owing to its advantageous combination of ultrasensitivity, high speed, low costs, multiplexing capability, and portability.

In this work we developed a series of SERS substrates with a nanostructured morphological surface by forming self-organized layers of silica (SiO_2) nanospheres on a Si substrate by drop-casting and subsequent thermal sputtering of a thin layer of silver (15 nm) and annealing in an inert argon atmosphere [4]. Optical reflectance spectra showed the presence of localized surface plasmon resonance (LSPR) bands centered around 420-425 nm. The following analogues of explosive substances were studied on these substrates: 4-nitrophenol, 1-nitronaphthalene, 5-nitroisoquinoline, and also picric acid. Those analyte molecules of different concentrations were drop-casted on the obtained SERS substrates and the Raman spectra were measured both from drop and dried sample, with a laser excitation wavelength of 457 nm (as it is resonant with the LPPR). Using Raman spectroscopy, the spectra of the studied samples with low concentrations (from 10^{-4} to 10^{-7} M for different analogues of explosive substances) was recorded (Fig. 1). For all analytes studied, the Raman enhancement coefficients were calculated, which ranged from 10^2 to 10^6 [5].

Also as another method of detecting explosive analogue materials was mixing analytes with silver (Ag) nanoparticles in solution. Raman spectra from those solutions also allowed low concentrations detection ($10^{-2} - 10^{-6}$ M).

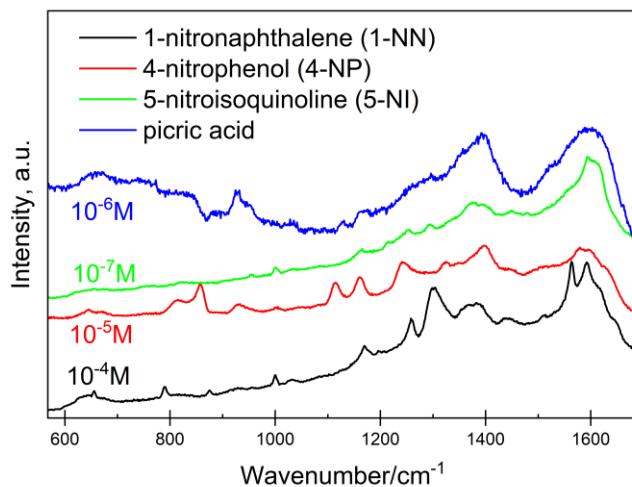


Figure 1. Raman spectra of investigated analytes on SERS substrates

Also a series of substrates were also manufactured, which are based on arrays of gold (and silver) nanoparticles, with the subsequent creation of a MIP (molecularly implanted polymer) layer, using the photochemical polymerization method with templates for the corresponding molecules (4-nitrophenol, 4-nitrotoluene). Studies of SERS signals from analogs of explosive substances deposited on the corresponding substrates using drop casting were carried out. Raman scattering spectra with a concentration of up to 10^{-5} M were recorded using SERS. Spectra of molecules that do not match their template on the substrate (deposited on a given substrate) were not recorded, indicating the selectivity of the substrate.

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

1. C. Muehlethaler, M. Leona, J. R. Lombardi. Review of surface enhanced Raman scattering applications in forensic science // Anal. Chem. 2016, 88, 152–169.
2. A. Hakonen, P. Andersson, M. S. Schmidt, et al. Explosive and chemical threat detection by surface-enhanced Raman scattering: A review // Anal. Chim. Acta, 893, 2015, 1-13.
3. F. Zapata, M. López-López, C. García-Ruiz. Detection and identification of explosives by surface enhanced Raman scattering // Appl. Spectrosc. Rev, 2016, 51:3, 227-262.
4. V. Dzhagan, N. Mazur, O. Kapush, et al. Self-organized SERS substrates with efficient analyte enrichment in the hot spots // ACS Omega 9, 2024, 4819–4830.
5. N. Mazur, V. Dzhagan, O. Kapush, et al. SERS of nitro group compounds for explosives sensing. RSC Adv., 2025, 15, 252-260

Еліпсометричні дослідження витриманих в парах ртуті аморфних плівок системи селен-миш'як

Поп М.М.^{1,2}, Рубіш В.М.^{1,2}, Ясінко Т.І.¹, Дуркот М.О.¹, Трунов М.Л.¹

¹Інститут проблем реєстрації інформації НАН України, Ужгород, Україна
center.uzh@gmail.com

²Ужгородський національний університет, Ужгород, Україна

Суттєва зміна електропровідності аморфних плівок на основі Se (системи Se-Te, Se-As, Se-Sb) з малим вмістом Te, As і Sb (до 15 ат. %) при їх модифікуванні ртуттю викликає, з практичної точки зору, інтерес до дослідження їх оптичних властивостей.

Дана робота присвячена дослідженню впливу парів ртуті на показники заломлення аморфних плівок системи Se-As. Методики одержання та модифікування плівок описані в роботі [1]. Модифікування плівок ртуттю проводилось протягом 24, 48 (Se, Se₉₇As₃, Se₉₁As₉) та 72 (Se₉₅As₅, Se₉₃As₇) год.

Дисперсія показника заломлення плівок системи Se-As досліджувалася з використанням спектрального еліпсометра HORIBA Smart SE. Визначення оптичних констант проводили у спектральному діапазоні 440–1000 нм під кутом падіння 70°. Отримані експериментальні спектри аналізувалися з урахуванням багатошарового відбивання в зразках за допомогою програмного забезпечення DeltaPsi2 з використанням моделі Тауц-Лоренца для номінально чистих плівок та з використанням моделі Тауц-Лоренца+Друде для модифікованих ртуттю плівок.

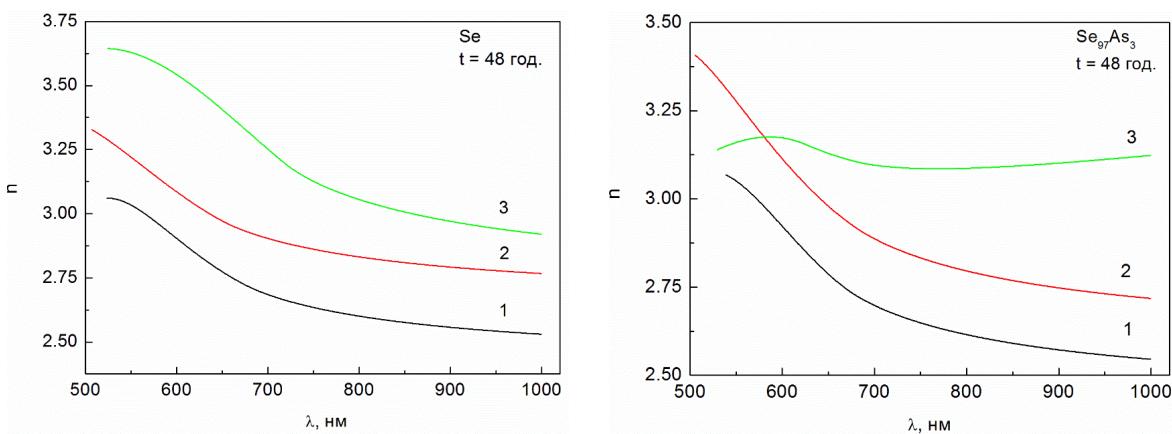


Рисунок. Дисперсія показників заломлення n_2 , n_2' і n_3 номінально чистих (1) та модифікованих ртуттю протягом 48 год. (2, 3) аморфних плівок Se і Se₉₇As₃

Дисперсія показників заломлення номінально чистих n_2 (1) та модифікованих ртуттю протягом 48 год. n_2' і n_3 (2, 3) аморфних плівок Se і Se₉₇As₃ наведена на рисунку. Тут n_2' і n_3 – показники заломлення

внутрішніх і приповерхневих шарів модифікованих ртуттю аморфних плівок, відповідно. В області прозорості плівок ($\lambda > 700$ нм) як для номінально чистих, так і модифікованих ртуттю плівок, спостерігається нормальний хід спектральних залежностей показників заломлення n_2 , n_2 , n_3 .

Визначені значення показників заломлення на довжині хвилі 1 мкм n_2 , n_2 , n_3 складають:

- для Se: $n_2 = 2.53$; $n_2 = 2.06$ і $n_3 = 3.04$ (24 год.), $n_2 = 2.77$ і $n_3 = 2.98$ (48 год.);
- для $\text{Se}_{97}\text{As}_3$: $n_2 = 2.54$; $n_2 = 2.72$ і $n_3 = 3.12$ (48 год.);
- для $\text{Se}_{95}\text{As}_5$: $n_2 = 2.55$; $n_2 = 2.71$ і $n_3 = 3.03$ (72 год.);
- для $\text{Se}_{93}\text{As}_7$: $n_2 = 2.56$; $n_2 = 2.57$ і $n_3 = 3.09$ (72 год.);
- для $\text{Se}_{91}\text{As}_9$: $n_2 = 2.59$; $n_2 = 2.59$ і $n_3 = 3.15$ (48 год.).

Зростом вмісту миш'яку у складі номінально чистих плівок системи Se-As показник заломлення зростає. Показники заломлення внутрішніх (n_2) і приповерхневих (n_3) шарів дещо зростає. Вищі значення n_2 і n_3 обумовлені тим фактом, що при модифікуванні плівок ртуттю проходить зміна їхньої структури і формування в приповерхневих шарах кристалічних включень селеніду ртути. Змінюється при цьому і структура внутрішніх шарів плівок.

Особливості поведінки концентраційних залежностей n_2 і n_3 пов'язані з наявністю в плівках системи Se-As з вмістом миш'яку в ділянці 5 ат.% топологічного структурного переходу від одновимірної до двовимірної структури.

1. Rubish V.M., Pop M.M., Pisak R.P., Makar L.I., Durkot M.O., Solomon A.M., Spesyvykh O.O., Boryk V.V., Dzumedzey R.O. Structural Studies of Mercury-Modified Amorphous Films of the Selenium-Antimony System. // Physics and Chemistry of Solid State, 2024. – V.25, No.1, – P. 164–169.

МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ ДИСПЕРСІЇ ПОКАЗНИКА ЗАЛОМЛЕННЯ ПЛІВКИ TiO_2 НА СПЕКТРАЛЬНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ОДНОШАРОВОГО ІНТЕРФЕРЕНЦІЙНОГО ПОКРИТТЯ НА СКЛЯНІЙ ПІДКЛАДИНЦІ

Рябощук О., Міца А.

Ужгородський національний університет, 88000, Україна, Закарпатська обл., м. Ужгород, пл. Народна, 3, E-mail: mitsa@uzhnu.edu.ua

Дисперсія показника заломлення оптичних матеріалів відіграє ключову роль у формуванні спектральних характеристик тонкоплівкових структур. Особливо важливим це питання стає при проектуванні оптичних покриттів та фотонних пристрій, де точне прогнозування оптичних властивостей є критично важливим для досягнення оптимальних параметрів пристрою [1].

Діоксид титану (TiO_2) широко використовується в оптоелектроніці завдяки своїм унікальним оптичним властивостям: високому показнику заломлення, широкій забороненій зоні та хімічній стабільноті. Однак при моделюванні оптичних характеристик плівок TiO_2 [2] часто нехтуєть дисперсією показника заломлення, що може призводити до значних похибок у прогнозуванні спектральних характеристик.

У даній роботі представлено комплексне дослідження впливу дисперсії показника заломлення [3] на спектральні характеристики пропускання одношарової плівки TiO_2 товщиною 600 нм. Моделювання проводилося з використанням повного матричного методу [4-5] для структури повітря- TiO_2 -скло в спектральному діапазоні 400-800 нм.

Аналіз дисперсії показника заломлення TiO_2 [3] показав значну варіацію показника заломлення у досліджуваному спектральному діапазоні (рис. 1). Показник заломлення змінюється від 2.52 до 2.996, що відповідає $\Delta n = 0.476$ при середньому значенні $\bar{n} = 2.647$. Відносна дисперсія становить 17.99%, що свідчить про необхідність врахування цього ефекту при точних розрахунках.



Рис. 1. Дисперсія показника заломлення TiO_2 : залежність від довжини хвилі в діапазоні 400-800 нм [2]

Спектральні характеристики пропускання плівки TiO_2 товщиною 600 нм демонструють кардинальні відмінності при врахуванні дисперсії (рис. 2). Детальний аналіз показує суттєві зміни в положенні інтерференційних максимумів і мінімумів. Без врахування дисперсії спостерігається регулярне чергування максимумів і мінімумів з відносно стабільними інтервалами. При врахуванні дисперсії відбувається характерний зсув інтерференційних смуг у бік коротших довжин хвиль, що обумовлено зміною оптичної товщини плівки внаслідок дисперсії показника заломлення.

Особливо помітні зміни спостерігаються в рівні пропускання мінімумів. При відсутності дисперсії мінімуми пропускання досягають значень близько 66-70%, тоді як при врахуванні дисперсії глибина мінімумів збільшується, знижуючись до 49-55%.

TiO₂ Transmission Spectrum - Thickness: 600 nm

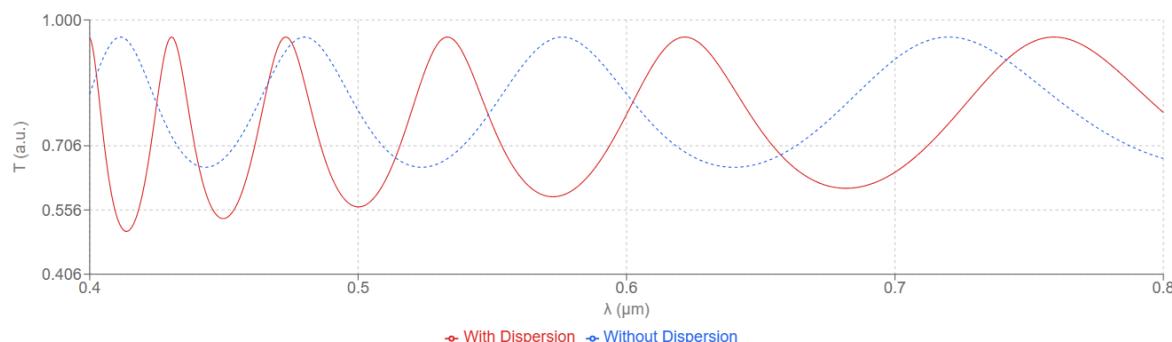


Рис. 2. Спектри пропускання плівки TiO_2 товщиною 600 нм: порівняння результатів з врахуванням дисперсії (помаранчева лінія) та без неї (синя лінія).

Аналіз різниці пропускання між моделями показує максимальні відхилення до 44.97%, що є критично важливим для практичних застосувань. У спектральних областях максимумів різниця може сягати +28.7%, тоді як у мінімумах спостерігаються від'ємні відхилення до -45%. Розподіл різниць характеризується негативною асиметрією (-0.05) зі стандартним відхиленням 19.26%.

1. Фізичні основи нелінійної оптики напівпровідників. Укладачі: І.Фекешгазі, В.Міца, В.Кут, Р.Голомб, М.Вереш.-Ужгород: УжНУ. 2025. - 104 С.
2. Siefke T., Kroker S., Pfeiffer K., Puffky O., Dietrich K., Franta D., et al. Materials pushing the application limits of wire grid polarizers further into the deep ultraviolet spectral range. // Advanced Optical Materials. – 2016. – Vol. 4, No. 11. – P. 1780-1786.
3. Devore J.R. Refractive indices of rutile and sphalerite. // Journal of the Optical Society of America. – 1951. – Vol. 41, No. 6. – P. 416-419.
4. Macleod H.A. Thin-Film Optical Filters. -- CRC Press, 2017.
5. Poelman D., Smet P.F. Methods for the determination of the optical constants of thin films from single transmission measurements. // Journal of Physics D: Applied Physics. -- 2003.

Дослідження тривалої фосфоресценції та релаксації струму провідності кристалів ZnSe високої оптичної якості

Б.В. Кожушко², В.Я. Дегода¹, Г.П. Подуст¹, М.В. Бондар²

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, Physics Department, 03680 Kyiv, Ukraine

² Інститут фізики Національної академії наук України, Київ, bkozhush@ukr.net

Експериментальна крива фосфоресценції показує, що на відповідних центрах в напівпровіднику відбувається накопичення світлосуми, однак лише з цього факту практично неможливо одержати достовірні параметри матеріалу. Для цього необхідно одночасно реєструвати серії кривих фосфоресценції та релаксації струму провідності при різних дозах опромінення, теоретичні залежності для опису яких були отримані авторами в [1].

Метою роботи було визначення параметрів центрів свічення, які обумовлюють тривалу фосфоресценцію та релаксацію струму провідності, з дозових залежностей фосфоресценції та релаксації струму провідності, отриманих при різних інтенсивностях рентгенівського збудження, а також вивчення впливу інтенсивності збудження на ці залежності.

Дозові залежності фосфоресценції та релаксації струму провідності вимірювались одночасно після рентгенівського опромінення за фіксований час при $T = 85$ К. Після опромінення та релаксації фосфоресценції та струму провідності вимірювали термостимульовану люмінесценцію (ТСЛ) та термостимульовану провідність (ТСП).

Різні інтенсивності (при 5 і 25 мА режимах роботи рентгенівської трубки) та тривалості (від 5 с до 2 год) рентгенівського збудження дозволяли діяти на досліджувані зразки різними дозами опромінення. Виявилось, що інтенсивність фосфоресценції була більшою для вищої інтенсивності та меншого часу збудження, що свідчить про накопичення в зразку більшої кількості носіїв на пастках.

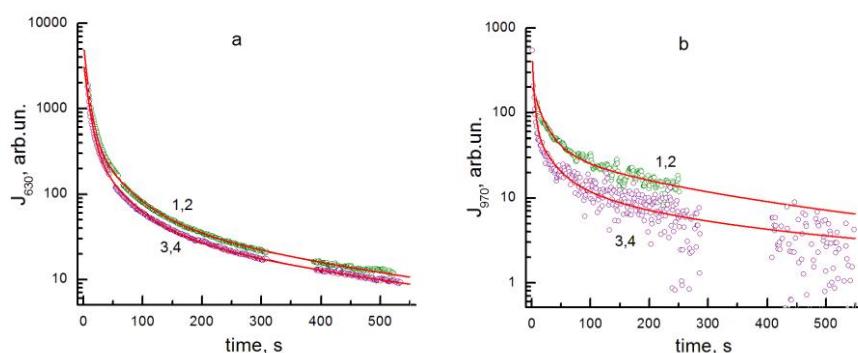


Рис. 1. Затухання фосфоресценції в смугах 630 нм (а) та 970 нм (б) зразка №1 ZnSe при $I_{X1} = 0.64$ мВт/см² (1) і $I_{X2} = 0.13$ мВт/см² (3) та часу опромінення $t_1 = 1$ min (1) і $t_2 = 5$ min (3) (точки); лінії - теоретичні залежності (2,4) при $T = 85$ К

На рис. 2 наведені криві релаксації струму провідності при однакових умовах для двох зразків ZnSe, звідки видно, що ситуація кардинально змінюється впродовж тривалості процесу релаксації. Для мілких пасток спостерігається пропорційність між концентраціями вільних і локалізованих носіїв заряду, тому, на початковому етапі процесу релаксації, величина струму релаксації пропорційна інтенсивності збудження.

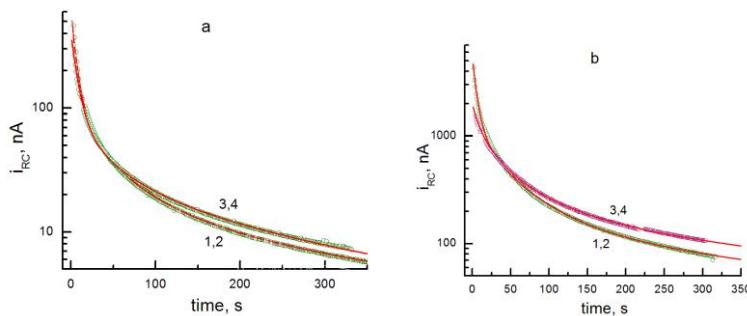


Рис. 2. Релаксація струму провідності в зразках №1 (а) і №2 (б) ZnSe при I_{X1} (1) і I_{X2} (3) та часу опромінення $t_1 = 1$ min (1) і $t_2 = 5$ min (3) (точки); лінії - теоретичні залежності (2,4) при $T = 85$ К.

Дослідження тривалої фосфоресценції і релаксації струму провідності нелегованих високоомних кристалів ZnSe високої оптичної якості при різних температурах показали, що вони обумовлені делокалізацією носіїв заряду практично з усіх пасток, при цьому, в процесі релаксації спостерігається проміжна локалізація носіїв заряду на інших пастках. Отримані теоретичні залежності для інтенсивності фосфоресценції та величини струму провідності в аналітичному вигляді, які враховують проміжні акти локалізації носіїв заряду на більш мілких пастках. Встановлено, що при температурі збудження у фосфоресценції та релаксації струму провідності беруть участь як мінімум три типи пасток (мілка, фосфоресцентна та глибока) [2], рівень заповнення яких залежить як від інтенсивності збудження, так і від загальної дози опромінення.

Проведені дослідження підтверджують, що накопичення світлосуми в кристалах ZnSe відбувається по експоненціальному закону з різними постійними часу, що добре узгоджується з дозовими залежностями ТСЛ і ТСП.

1. V.Ya Degoda, G.P. Podust, I.Yu. Doroshenko, N.Yu Pavlova. Phosphorescence and conduction current relaxation in ZnSe crystals/ Optical Materials, Volume 129, 2022, 112460, ISSN 0925-3467, <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2022.112460>

2. V.Ya. Degoda, G.P. Podust, V.R. Savchuk, B.V. Kozhushko, M.V. Bondar, O.V. Tverdokhlibova. Dose Dependences of Phosphorescence and Conduction Current Relaxation in Single Crystals of Zinc Selenide/ Physics and Chemistry of Solid State, V. 25, No. 4 (2024) pp. 811-815, DOI: 10.15330/pcss.25.4.811-815

Зміст

ПЛЕНАРНІ ДОПОВІДІ INVITATION REPORT	5
<i>Березников О.В., Морозовська Г. М., Ю.М. Височанський. Флексо-фонони та флексо-феррони у Ван-дер-Ваальсівських сегнетіелектриках: аналітична теорія і низькотемпературні піроелектричні ефекти</i>	7
<i>P. Голомб, А. Чакі, Б. Зентай, Л. Хіміч, М. Верес. Ідентифікація ДНК послідовностей та однонуклеотидного поліморфізму методом Раман-спектроскопії</i>	10
<i>D. Tsulyanu. On the structural self-organisation of semiconducting glasses of the As-S-Ge ternary</i>	13
<i>Denis Flandre, Noémie Bidoul, Grégoire Brandsteert, Jean-Charles Delvenne, Thomas Ratier, Xi Zeng, Léopold Van Brandt. Emerging vanadium dioxide memristor-based spiking concepts towards analog neuromorphic event sensing</i>	15
<i>A.N. Nazarov, A.V. Vasin, A.V. Rusavsky, O.M. Slobodyan, Yu.V. Gomeniuk, P.M. Okholin, P.M. Lytvyn, O.I. Gudymenko, T.Yu. Sabov, D.V. Kysil, S.I. Tiagulskiy, R. Yatskiv, G.Ya. Kolbasov, I.A. Rusetskii, R.B. Kozakevich, V.S. Lysenko. Graphitised C:H&C:Nx films with tunable nano/meso-porous morphology fabricated by Magnetron Plasma Enhanced CVD technique as an effective functional layer for gas sensor and catalytic applications</i>	17
<i>S. M. Kukhtaruk, V. A. Kochelap. Amplification of coherent acoustic pulses in the media with excited optical phonons</i>	19
<i>Serhiy Kondratenko, Oleksandr Datsenko, Fernando M. de Oliveira, Serhii Kryvyi, Kateryna Yablochkova, Peter M. Lytvyn, Morgan E. Ware, Serhii Maliuta, Shui-Qing Yu, Yuriy I. Mazur, and Gregory J. Salamo. Impedance spectroscopy and ac conductivity mechanism in GeSn Thin Films</i>	21
<i>V. Dzhagan, O. Stroyuk, D.R.T. Zahn. Optical spectroscopy and perspective applications of semiconductor quantum dots</i>	22
<i>V. N. Sokolov, V. A. Kochelap. Peculiarities of long-wavelength plasmons and two-stream instability in double-layer quantum heterostructures</i>	23
<i>Yu. Vysochanskii, A. Kohutych, V. Liubachko, R. Yevych, K. Glukhov, M. Medulych, V. Hryts, M. Pop, A. Pogodin. Nonlinear dynamics and polar properties of the van der Waals ferrielectric CuInP₂S₆</i>	25
<i>V.V. Koroteyev. THz properties of plasmonic crystal structures</i>	27
<i>Sandor Kokenyesi. Amorphous chalcogenide semiconductors: science, education and basis for co-operation</i>	29
<i>В.О. Юхимчук, Н.В. Мазур, О.Й. Гудименко, Т.М. Сабов, В.М. Джаган, П.М. Литвин, А.М. Дмитрук, О.В. Косуля, О.В. Дубіковський, М.Я. Валах. Формування та властивості GeSn та GeSn:C плівок на Si підкладках</i>	30

<i>O. Yastrubchak, N. Tataryn, S. Mamykin, V. Romanyuk, O. Kondratenko, L. Borkovska, L. Khomenkova, V. Strelchuk, A. Nikolenko, I. Danylenko, X. Liu, B. A. Assaf, J. K. Furdyna, Y. Ichiyanagi, O. Fedchenko, V. Volobuiev, M. Sawicki, J. Sadowski.</i> Role of Mn Ions in Shaping Electronic and Magnetic Properties of Dilute Semiconductor Alloys and Topological Materials	32
<i>Крючин А.А., Антонов Є.Є., Зенін В.М.</i> Плоско-фокусувальна оптика для напівпровідників концентраторних сонячних фотоперетворювачів	34
<i>Cmpixa M.B., Морозовська Г. М., Височанський Ю. М.</i> Гетероструктура CuInP ₂ S ₆ -2D MoS ₂ – SiO ₂ як основа для створення польових транзисторів з підпороговим розкидом, нижчим від Больцманової межі	36
<i>T. Kavetsky, A. Tuzhykov, Y. Kukhazh, N. Hoivanovych, P. Grozdov, O. Šauša, B. Zgardzińska, J. Warowna, V. Soloviev, A. Kiv.</i> Positron annihilation and AI-driven methodology in biosensing	38
<i>Andriy Dmytruk, Igor Dmytruk, Viktor Kadan.</i> Femtoseconds for semiconductors	40
<i>Фекешгазі I., Міца В., Күтм B., Голомб Р., Вереш М.</i> Нелінійна оптики напівпровідників	42
<i>Pavlo Sai, Maksym Dub, Serhii Kukhtaruk, Martin Mittendorff, Wojciech Knap, and Vadym V. Koroteyev</i> Nonlinear THz spectroscopy of GaN-based plasmonic crystals	45
Секція 1. Нові фізичні явища в об'ємі та на поверхні напівпровідників	
Section 1. New physical phenomena in volume and on the semiconductor surface	47
<i>B.B. Галян, О.П. Березнюк, Т.К. Мельничук(Яцинюк), Б.М. Світліковський, B. Артиюх, A.P. Шульгач, O.M. Шевчук.</i> Спектри поглинання та люмінесцентні властивості стекол системи Ag ₂ S-GeS ₂ -Sb ₂ S ₃ легованих Er ³⁺ та Nd ³⁺	49
<i>F. Sizov, Z. Tsybrii, K. Svezhentsova, M. Vuichyk, A. Yevmenova, O. Gudymenko, O. Kosulya.</i> Enlightenment of HgCdTe (MCT) by implantation	51
<i>B.T Довгий, A.B. Боднарук, O.C. Пилипчук, P.M. Кравчук, B.YO.Дмитренко, B.B. Чижко.</i> Магнетні і діелектричні властивості мультифероїка складу Bi _{1-x} Y _x FeO ₃	53
<i>Bratus O.L., Semeniuk A.S., Kykot A.M., Sopinskyy M.V., Gudymenko O.Yo., Khomenkova L.Yu., Yukhymchuk V.O., Sabov T.M., Oberemok O.S, Kysil D.V. and Evtukh A.A.</i> Peculiarities of the influence of annealing temperature on the structural and electrical properties of nanocomposite SiO _x (Si)&Cu _y O(Cu) films	55
<i>C.B. Луньов, M.B. Хвищун, Д.А. Захарчук, B.T. Маслюк.</i> Електричні властивості опроміненого електронами n-Ge	57

<i>Індутний І.З., Минько В.І., Сопінський М.В., Мамикін С.В.</i> Дослідження фотостимульованої дифузії срібла в тонкоплівковій структурі Ag–As ₂ S ₃ методом реєстрації поверхневих плазмон-поляритонів	59
<i>В.М. Кадан, А.М. Дмитрук, І.О. Павлов, І.М. Дмитрук.</i> Надшвидке двофотонне оптичне стробування у кремнієвому CMOS-сенсорі для візуалізації крізь розсіювальне середовище	61
<i>Н.І. Каширина, Л.В. Борковська, Я.О. Каширина, О.С. Муратов, О.С. Роїк.</i> Вплив розподілу атомів Mg і Ti на фізичні властивості кубічного Mg ₂ TiO ₄	63
<i>Кондрат О.Б., Міца О.В., Голомб Р.М., Чік А., Токач В., Кондрат О.О., Міца В.М., Верещ М., Паюк О.П., Сtronський О.В.</i> Перспективні матеріали для нанооптики та комп'ютерної техніки на основі халькогенідів As ₂ S ₃ , легованих MnO	65
<i>T.M. Kovalchuk, O.V. Kovalchuk, K. Zolochevska, P. Kopčanský, J. Prochazkova, I. Safarik.</i> Effect of modification of nonwoven textiles with biochar and multi-walled carbon nanotubes on their dielectric properties	67
<i>N.A. Kurgan, V.L. Karbivskyy, I.V. Sukhenko, S.S. Smolyak.</i> Physical properties of lead oxo apatites	69
<i>С.В. Луньов, П.Ф. Назарчук, О.В. Бурбан, В.М. Єрмаков.</i> Кінетичні ефекти в одновісно деформованому n-Ge	71
<i>Пресс В.М., Балабай Р.М., Ніколенко В.Б.</i> Трибоелектричний наногенератор на основі зім'ятих золотих плівок: розрахунки з перших принципів	73
<i>N.A. Kurgan, V.L. Karbivskyy, I.V. Sukhenko, S.I. Shulyma.</i> Structure and optical properties of lead vanadate apatite with copper substitution	75
<i>V. E. Slyntko, L. Kilanski, B. Brodowska, O. A. Sydor, V. M. Vodopyanov.</i> The influence of the crystal lattice thermal vibrations on the RKKY interaction in Ge _{1-x-y} Sn _x Mn _y Te single crystals	77
<i>Степанюк О.М., Балабай Р.М.</i> Адгезія кристалічного CO ₂ до алюмінію: розрахунки з перших принципів	79
<i>Trokhimchuck Petro.</i> Laser-induced optical breakdown of solids	81
<i>Л. Панасюк, Д.Захарчук, С.Федосов, Ю.Коваль, Л. Ящинський.</i> Ударна іонізація мілких донорів в Si та Ge в умовах деформаційно-індукованого переходу метал-ізолятор.	83
<i>D.A. Kuznetsova, P.S. Smertenko, N.M. Roshchina, Y.M. Nasieka, S.V. Mamykin.</i> Morphology of films on a patterned silicon substrate from a two-component solution of heterocyclic amines	85
Секція 2. Фізичні явища у низькорозмірних структурах Section 2. Physical phenomena in low-dimensional structures	87
<i>Дубіковський О., Антонін С., Мельник В., Оберемок О., Романюк Б., Пантелеєв О.</i> Особливості мас-спектрометричних досліджень нанорозмірних структур	89

<i>O.YU. Бережний, P.YU. Корольков, A.B. Коротун.</i> Оптичні властивості гібридної системи «сферична метал-діелектрична наночастинка – напівпровідникова квантова точка»	91
<i>Д. I. Блецкан, В. В. Вакульчак, A. I. Гапак.</i> Електронна структура SiTe ₂	93
<i>Даньків O.O., Кузик O.B., Столлярчук I.D., Столлярчук A.I., Стецко B.M.</i> Вплив електричного поля на синтез та сенсорні властивості біонанокомплексів квантова точка – HSA	95
<i>Roman Demediuk, Volodymyr Akimov, Viktor Tulupenko, Anton Tiutiunnyk, Oksana Fomina, Carlos A. Duque, Alvaro L. Morales, David Laroze, Miguel Eduardo Mora-Ramos, Olha Miezientseva.</i> Resonant Impurity States and Wave Functions in Quantum Wells	97
<i>Д.В. Дем'яненко, В.І. Рева, A.B. Коротун.</i> Квантова ефективність фотодетекторів із впровадженими в напівпровідникову матрицю плазмонними наночастинками	99
<i>Коротєєв В.В. Романюк Б., Сапон С., Кульбачинський, Мельник В. Максименко З., Дубіковський О.</i> Використання поверхнево плазмоного резонансу в лавинних кремнієвих фотодіодах	101
<i>Evtukh A.A., Antonin S.V., Muryi Ya.Yu., Pylypov A.I., Kizjak A.Yu., Pylypova O.V., Bratus O.L.</i> Negative capacitance effect in the structures with nanocomposite films	103
<i>L.L. Fedorenko, I.A. Izmailov, V.V. Naumov, V.O. Yukhymchuk, A. Medvids.</i> Peculiarities of spontaneous and stimulated UV photoluminescence in micro/nanocrystalline ZnO powders	105
<i>Юлія М. Гуденко, Олександр С. Пилипчук, Віктор В. Вайнберг, Віктор І. Стьопкін, Ігор В. Фесич, Юрій О. Загородній, Леся П. Юрченко, Анна О. Дяченко, Михайло П. Трубіцин та Володимир М. Порошин.</i> Ефект акумуляції заряду та зміни провідності в Hf _{0,5} Zr _{0,5} O ₂ наночастинках	106
<i>I. Gvozdovskyy, H. Bohatyryova, S. Schwarz, K. Bischoff, R. Hellmann, I. Koshets, A. Korchovij, P. Lytvyn, S. Chernyshuk.</i> The stabilization of azimuthal anchoring of LIPSS-modified SiO ₂ surfaces by polymer post-treatment	108
<i>Гайсак M.I.</i> Розрахунок оптичного спектру мас молекул тричастинкових іонів мюонію в одновимірному просторі	110
<i>Kashuba A.I., Ilchuk H.A., Semkiv I.V.</i> Optical properties of cadmium chalcogenides nanoparticles	112
<i>Kияєв O.E.</i> Фотонна емісія з планарних наноструктур золота на діелектричній підкладці	114
<i>Kravchenko S.O, Boltovets P.M., Kovalenko O.G., Snopok B.A.</i> Spectral features in nanocomposite film materials based on polysaccharides	116

<i>A.I. Krivchikov, & A. Jeżowski.</i> Thermal Transport and the Boson Peak in Disordered and Layered Solids	118
<i>Liakhovetskyi V., Rudenko V., Styopkin V., Brodin A., Volovyk M.</i> Nonlinear properties of Au(nanoparticle)-Al ₂ O ₃ -PdO thin films under nanosecond laser excitation at 532 and 1064 nm	120
<i>V. Liubachko, R. Yevych, V. Yevych, Yu. Vysochanskii.</i> Thermal conductivity features in phosphorus van der Waals chalcogenides near the morphotropic phase boundary	121
<i>Lyaschuk Yu. M., Korotyeyev V.V.</i> A novel theoretical framework for 2D magnetoplasmon dispersion: a Laplace transform approach	123
<i>Матяш I.Є., Мінайлова І.А., Братусь О.Л., Семенюк А.С.</i> Поляризаційні дослідження тонких плівок CuO	125
<i>Maziar D.M., Kolomys O. F., Nikolenko A.S., Strelchuk V.V., Lytvyn P.M., Tsybrii Z.F., Melezhyk Ye.O., Zabudsky V.V., Kukhtaruk N.I.</i> The influence of Ar+ implantation on infrared emission properties of phase-change VO ₂ thin films	127
<i>I.B.Мінтянський, В.Т.Маслюк, П.І.Савицький.</i> Вплив різних доз електронного опромінення на електричні властивості вздовж шарів n-InSe	129
<i>O. Оберемок, O. Єфремов, B. Єшан, O. Косуля, B. Федулов, O. Пантелеєв.</i> Вплив механічних напружень на швидкість розпилення наноструктур	131
<i>I.B. Оленич, Л.С. Монастирський, Б.С. Соколовський, Б.І. Турко, O.C. Дзензелюк.</i> Польові транзистори на основі плівки відновленого оксиду графену для реєстрації іонізуючого випромінювання	133
<i>V.F. Onyshchenko, L.A. Karachevtseva.</i> Optimization of the reflectivity of two-layer macroporous silicon.	135
<i>T. Polek, A. Bodnaruk, V. Kalita, S. Ryabchenko, A. Tovstolytkin.</i> Magnetic and Thermal Characteristics of CaFeO ₂ Nanoparticles under Alternating Magnetic Fields	137
<i>V.V. Ponomarenko, Yu.Yu. Bacherikov, A.Z. Sadigov, O.B. Okhrimenko, A.G. Zhuk, F.I. Ahmadov, I.A. Danilenko, A.I. Lyubchyk, S.I. Lyubchyk.</i> Potential barrier in a two-layer porous structure based on ZrO ₂ and Ca ₆ H ₂ O ₁₉ Si ₆ which filled with electrolyte (H ₂ O).	139
<i>Сахнюк П.В., Замуруєва О. В., Сахнюк В. Є.</i> Резонансне тунелювання крізь подвійний потенціальний бар'єр в графені	141
<i>П.І.Савицький, I.B.Мінтянський, M.B.Товарницький.</i> Вплив легування Ge на електричні характеристики кристалів моноселеніду індію	143
<i>C.I. Козловський, К.Л. Коваленко, M.M. Шаран.</i> Мультиіонне розсіювання заряджених носіїв заряду на іонізованих домішках у сильно легованих напівпровідниках: від об'ємних кристалів до нанодротів	145

<i>Шимановський А. Р., Клепіков В. Ф.</i> Нелінійні властивості просторової модуляції параметру порядку в тіокарбаміді	147
<i>P.S. Smertenko, V.V. Naumov, V.V. Shymanovska, V.O. Yukhymchuk.</i> Specific features of dark and light current-voltage characteristics of micro/nanocrystalline TiO ₂ powders	148
<i>Снопок Б.А., Тетяnenко М.П., Корчовий А. А., Мамикін С.В., Шварц М.М., Шварц Ю.М.</i> Нанорозмірний топографічний ефект самоорганізації в надтонких плівках золота	149
<i>Д.О. Стеценко, Ю.М. Гуденко, О.С. Пилипчук, В.В. Вайнберг, С.Е. Іванченко, І.А. Гвоздовський, В.М. Порошин, Г.М. Морозовська.</i> Механізм перезарядки зарядових станів на поверхні наночастинки BaTiO ₃ в матриці рідкого кристалу	151
<i>I. Stolyarchuk, O. Kuzyk, O. Dan'kiv, A. Stolyarchuk, A. Popovych, O. Bachynskyi.</i> Structural, optical and magneto-optical properties of ZnMeO (Me - Mn, Co, Ni) thin films	153
<i>G. I. Syngayivska, V. V. Koroteyev, and V. A. Kochelap.</i> Monte Carlo simulation of high-field and high-frequency transport characteristics of 2D electron gas in GaN-based quantum wells	155
<i>Тріщук Л.І., Пащенко Г.А., Тріщук Р.Л., Томашик В.М., Капуш О.А.</i> Впровадження нанокристалічного CdTe в пористий кремній і фотолюмінесценція отриманих структур	157
<i>О.В. Коваленко, В.Ю. Воровський, В.В. Славний.</i> Вплив концентрації Mn та температури синтезу на структурні та магнітні властивості НК ZnO:Mn	159
<i>Михайлівська К.В., Литвин В.К., Шепелявий П.Є., Індутний І.З., Сопінський М.В.</i> Оптичні і світловипромінюючі властивості nps-Si—SiO _x :Sm наноструктур	161
<i>I. Stolyarchuk, O. Kuzyk, A. Popovych, A. Stolyarchuk, V. Popovych, O. Bachynskyi.</i> Synthesis of ZnTiON oxynitride nanostructured thin films and their optical properties	163
<i>Б.А. Снопок, М.П. Тетяnenко, М.М. Шварц, Ю.М. Шварц.</i> Особливості нанокристалічного германію в перехідному шарі між аморфною та полікристалічною фазами	164
<i>Козловський С. І., Коваленко К. Л. та Шаран М. М.</i> Рухливість 2D електронного газу в полярних напівпровідниках	166
<i>Головацький В.А., Ярема В.В.</i> Вплив електричного поля на внутрішньозонне оптичне поглинання в еліптичних квантових кільцях та нанотрубках GaAs	168
<i>А.В. Кирилюк, В.М. Калита, Ю.І. Джесжеря, С.В. Черепов, Ю.Б. Скирта, С.О. Решетняк, А.В. Боднарук, С.М. Рябченко.</i> Гістерезис індукованої магнітним полем деформації вигину балки магнітоактивного еластомера	170

<i>B.Lukyanets, D.Matulka.</i> Qualitative analysis of the differences in physical properties of multilayer structures of quasi-2D crystals	172
<i>Головацький В.А., Головацький І.В., Маханець О.М.</i> Ефективний переріз фотоіонізації воднеподібної домішки в лінзоподібних квантових точках GaAs	174
<i>R. A. Redko, V. V. Shvalagin, G.V. Milenin, S.M. Redko.</i> Shift of LSPR peak of ZnO/Ag nanocomposites due to ZnO magnetic field pre-treatment	177
<i>Galyna Rudko, Oksana Strilchuk, Evgen Gule, Oksana Lytvyn, Volodymyr Maslov, Baolai Liang and Yuriy I. Mazur.</i> Radiation-induced modification of uncapped InGaAs/GaAs quantum dots	179
<i>S.M. Redko, G.V. Milenin, V.V. Shvalagin, R.A. Redko.</i> Effect of ZnO Refractive Index variation on the LSPR peak of ZnO/Ag Nanocomposites	181
<i>Kaliuzhnyi V.V., Redko R.A., Kolomys A.F., Belyaev A.E.</i> Temperature dependence of electron effective mass in InGaN quantum wells	18
Секція 3. Фізика напівпровідникових приладів Section 3. Physics of semiconductor devices	185
<i>B.P. Колбунов, М.П. Трубіцин, А.О. Дяченко.</i> Кінетіка струму в склокерамічних матеріалах на основі VO ₂	187
<i>V. Bilanych, S. Vorobiov, M. Bilanchuk, V. Kormosh, E. Mudra, I. Shepa, D. Kondrakhova, V. Komanicky.</i> Gas-sensing properties of tin dioxide layers doped with platinum nanoparticles	189
<i>O. M. Demenskyi, V. A. Krasnov, S. Yu. Yerochin.</i> Express Assessment of the Electron Drift Velocity in Power 4H-SiC Schottky Diodes	191
<i>Козярський І.П., Орлецький І.Г., Ілащук М.І., Майструк Е.В., Козярський Д.П., Варібок Р.В.</i> Виготовлення методом спрей-піролізу гетероструктур FTO/n-Fe ₂ O ₃ /p-Cd _{1-x} Zn _x Te з діодними властивостями	193
<i>Kruglenko Ivanna, Snopok Borys, Burlachenko Julia .</i> Surface Modification on the nanostructures TiO ₂ and their applications in gas sensors	195
<i>Криховецький М.В., Яворський Р.С., Никируй Л.І., Глеб В.Ф.</i> Порівняльна характеристика тонкоплівкових фотоелементів на основі CZTS та CIGS	197
<i>В.П. Кислий, В.О. Мороженко, Ю.Г. Сервоїжскін.</i> Вузькосмугові випромінювачі середнього інфрачервоного діапазону	199
<i>Я. Лепіх, А. Карпенко, А. Балабан.</i> Підходи до інтелектуалізації сенсорів, побудованих на основі різних фізичних принципів	201
<i>S.V. Mamykin, Yu.M. Lyaschuk, I.Z. Indutnyi, V.I. Myn'ko, V.R. Romanyuk, I.B. Mamontova, R.A. Redko, M.G. Dusheyko, Ye.M. Savchuk, V.O. Tochkovyi.</i> Functional devices and sensors based on plasmon-polariton photodetectors	202

<i>V.O. Morozhenko, V.V. Chernenko. Realization of dynamic thermal radiation control from photonic structure by contact injection</i>	204
<i>В.П. Кислий, В.Й. Піна. Перетворення теплової енергії в електричну при фотомагнітному ефекті</i>	206
<i>V.F. Onyshchenko, L.A. Karachevtseva. Absorption of one-layer and two-layer macroporous silicon.</i>	208
<i>Борковська Л.В., Кислий В.П., Мороженко В.А., Сервохаскін Ю.Г., Солов'йов С.А., Настич В.М. Дослідження параметрів коливань мін або інших прихованіх в землі об'єктів при взаємодії із зовнішнім акустичним опроміненням</i>	210
<i>Shwarts Yu. M., Shwarts M. M., Belyaev O. E., Sokolov V. M. The behavior of advanced silicon diode thermometers under the influence of magnetic field at low temperature range</i>	212
<i>F. Sizov. Detectors and Sources Features for THz Imaging, Communication and Biomedicine applications</i>	214
<i>Сльотов М.М., Сльотов О.М., Кінзерська О.В., Савчук О.Ю. Високотемпературні світловипромінювачі на основі гетерошарів α, β-ZnSe</i>	215
<i>I. O. Соколовський, A.B. Саченко, В.П. Костильов, А.Й. Шкrebтій Врахування перепоглинання фотонів у випромінювальній рекомбінації в GaAs сонячних елементах</i>	217
<i>Володимир Яськів, Анна Яськів, Валерій Лазарюк Високоякісне енергетичне забезпечення критичних технологій</i>	219
<i>Яворська Л.О., Никируй Л.І., Яворський Р.С. "Гібридні фото- та термоелектричні перетворювачі енергії: перспективи підвищення ефективності сонячних систем"</i>	220
<i>V. Zabudsky, O. Bratus, O. Golenkov, N. Kukhtaruk, I. Lysiuk, Ye. Melezhyk, IR and THz broadband sensitive structure based on nanocomposite p-Si/SiO_x(Si)&Al_yO_z(Al) films</i>	222
<i>В.М. Власюк, А.В. Саченко, В.П. Костильов, Р.М. Коркішко, І.О. Соколовський, В.В. Черненко Особливості моделювання текстурзованих кремнієвих сонячних елементів з тиловим розміщенням колекторного р-п переходу</i>	224
<i>Данько В.А., Минько В.І., Беляєв О.С., Індутний І.З., Мамікін С.В. Створення зустрічно-ширьових контактів за допомогою інтерференційної фотолітографії</i>	226
<i>P.M. Коркішко, В.М. Власюк, В.П. Костильов, О.Я. Оліх, В.В. Черненко. Вплив асоціації-дисоціації пар FeB на світлові вольтамперні характеристики кремнієвих сонячних елементів</i>	228
<i>Мазурик С.В., Коваленко О.В., Коjsan О.Є. Метод діагностики працездатності сонячних батарей</i>	230

<i>Попов А.В., Гомоннай О.О., Бабука Т.Я.</i> Моделювання генерації чотирихвильового змішування у WDM-системах з різними інтервалами між оптичними каналами	232
<i>A.I. Tkachuk, V.V. Tetyorkin, A.Z. Yevmenova, K.V. Andrieieva.</i> Ohmic and Rectifying Contacts to Narrow-Gap Semiconductors	234
<i>Попов А.В., Гомоннай О.О., Попович В.С.</i> Оптимізація оптоволоконних WDM-систем для мінімізації ефектів вимушеної Раманівського розсіювання світла	236
<i>С.О. Мележик, П.М. Литвин, З.Ф. Цибрій, В.В. Стрельчук, А.С. Ніколенко, В.В. Забудський, Н.І. Кухтарук, О.Ф. Коломис, А.А. Корчовий, В.І. Попенко, Д.М. Мазяр, М.А. Александров.</i> Особливості реєстрації тепловізійних сигнатур рухомих та стаціонарних об'єктів при добових і сезонних змінах навколошнього середовища	238
<i>V.Bilanych, S.Vorobiov, B.Bilanych, Yu.Matyovka, V.Rizak, A.Feher, V.Komanicky.</i> Use of chalcogenide films as photo- and electronic resists for the production of master originals of security elements using single-step dry lithography technology	240
<i>Качур Н.В., Маслов В.П., Федоренко А.В.</i> Удосконалений чутливий елемент сенсора на основі явища поверхневого плазмонного резонансу	242
Секція 4. Матеріалознавство, технології та діагностика напівпровідникових матеріалів	245
Section 4. Materials science, technology and diagnostics of semiconductor material	
<i>Костюкевич С.О., Крючин А.А., Петров В.В., Поп М.М., Рубіш В.В., Кайнц Д.І., Микайло О.А., Рубіш В.М.</i> Фотоіндуковані зміни оптичних параметрів плівок Sb_xSe_{100-x}	247
<i>V. Komanicky, V. Bilanych, S. Vorobiov, O. Shylenko, S. Soroka, V. M. Rizak, P. M. Lytvyn.</i> Electron beam induced phenomena in amorphous chalcogenide semiconductors and their applications	249
<i>V. Tkáč, P. Baloh, R. Tarasenko, M. Orendáč, A. Orendáčová, O. Mitsa, V. Mitsa, R. Holomb, A. Feher.</i> The correlation between the topology of nanoclusters and the nature of boson peaks in As-S class glasses	251
<i>Микита О.І., Феделеши В.І., Мікла В.Ю.</i> Акустичні властивості кубічних кристалів зі структурою аргіродиту	253
<i>Жихарєв В.М., Павлишин Р.Є.</i> Еліпсометричні вимірювання температурних залежностей комплексного показника заломлення стекол $(As_2S_3)_xGe_{1-x}$	255
<i>Н.В. Мазур, В.О. Юхимчук, О.Й. Гудименко, О.А. Капуш, В.С. Єфанов, В.М. Джаган, П.М. Литвин, А.М. Дмитрук, О.В. Косуля, О.В. Дубіковський.</i> Лазер індукована кристалізація іонно- (C+, B+) імплантованих GeSn плівок	257

<i>Virt I., Stefaniuk I., Cieniek B., Potera P.</i> Properties of pulsed laser deposited MWCNT thin films	259
<i>Mazur N., Konchits A.A., Shanina B.D., Vorona I.P., Isaieva O., Gule E.G., Zambzickaite G., Mikoliunaite L., Talaikis M., Yukhymchuk V.O. Dzhagan V.</i> Raman and EPR characterization of Fe_3O_4 nanoparticles and their composites with polymer	261
<i>M. Ciobanu, D. Tsiulyanu.</i> The features of the Urbach absorption edge of glassy $\text{AsS}_3\text{-GeS}_4$ thin films at thermal treatment	262
<i>Ю. М. Ажнюк, В. О. Юхимчук, А. І. Погодін, М. Й. Філен, В. В. Лопушанський, В. Ю. Ізай, В. М. Крищенік, І. М. Войнарович, О. В. Гомоннай.</i> Структурне і спектроскопічне дослідження фотоіндукованих перетворень у склах системи Ag-As-S	264
<i>T. Babuka, K.E. Glukhov, L.Yu. Kharkhalis, I. Babuka.</i> Mechanical properties of $\text{In}_{4/3}\text{P}_2\text{S}_6$ semiconductor under pressure: DFT simulation	266
<i>Баловсяк С.В., Заплітний Р.А., Яковлев І.С., Янчук І.В.</i> Аналіз фрактальної розмірності Х-променевих кривих	268
<i>V. Bilanych, S. Vorobiov, A. Pogodin, S. Hryhorevsky, V. Komanicky.</i> Charge-discharge processes in ceramic cells based on $\text{Ag}_{7-x}(\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x)\text{S}_5\text{I}$	270
<i>Бойко Б.Р., Єрмаков М.С., Пищеничний Р.М., Доброжан О.А., Опанасюк А.С.</i> Електричні властивості плівок ZnO легованих Cu	272
<i>I.M. Fodchuk, A.R. Kuzmin, S.V. Balovskyak, M.S. Solodkyi, I.I. Hutsuliak, V.V. Dovganyuk, R.A. Zaplitnyy, L.V. Drutsul.</i> The effect of the defect structure of high-resistance CdTe:Cl single crystals on performance of γ -radiation detectors	274
<i>П.О. Генцарь, А.М. Міняйло, Д.В. Пекур, Л.А. Демчина, М.В. Вуйчик, Ю.П. Кияк, О.І. Власенко.</i> Модуляційна спектроскопія сильнолегованого н- $\text{GaAs}(100)$	276
<i>Боледзюк В.Б., Камінський В.М., Нетяга В.В., Водоп'янов В.М.</i> Імпедансні властивості порошкових композитних матеріалів n-InSe – графіт	278
<i>M. Borcha, M. Solodkyi, S. Balovskyak, I. Hutsuliak, A. Kuzmin, L. Drutsul.</i> Investigation of structural heterogeneity of synthetic diamond crystals from analysis of normalized parameters of electron backscatter diffraction images	280
<i>L. Borkovska, K. Kozoriz, I. Vorona, A. Sidnev, Ye. Smortsova, L. Khomenkova.</i> Mn^{4+} red emission in MgAl_2O_4 spinel co-doped with manganese and TiO_2	282
<i>І.М. Фодчук, А.Р. Кузьмін, І.І. Гуцулляк, М.С. Солодкий, В.В. Довганюк, Р.А. Заплітний, Д.С. Макотяк, Т.А. Каземірський.</i> Дефектна структура високоомних монокристалів CdTe:Cl методом повної інтегральної відбивної здатності	284
<i>П.О. Генцарь, М.А. Міняйло, Д.В. Пекур, Л.А. Демчина, М.В. Вуйчик, Ю.П. Кияк, О.І. Власенко.</i> Оптична спектроскопія монокристалічних кремнієвих нанониток	286

<i>Маланич Г.П., Пекар Г.С., Сингаївський О.Ф., Томашик В.М., Локшин М.М.</i> Підвищення ефективності зонної очистки зруйнованих елементів оптичного германію	288
<i>V. E. Slyntko, L. Kilanski, M. Arciszewska, V. I. Ivanov, M. V. Tovarnytskyi</i> Features of dynamic magnetic susceptibility of semimagnetic $Ge_{1-x-y}Sn_xMn_yTe$ solid solutions	290
<i>V. Bratus', B. Shanina, I. Vorona, V. Golub, V. Lysakovskiy , S. Ivakhnenko, G. Kakazei.</i> Nanoscale inclusions of ferromagnetic metals in synthetic HPHT diamonds	292
<i>Ю.І. Чегіль, О.М.Буток, Д.Ю.Манько, Є.Є. Антонов, В.М. Джаган,</i> <i>Корчовий А.А.</i> Особливості безмаскового лазерного запису графічних зображень на тонких металевих плівках	294
<i>Danylenko I.M., Maziar D.M., Kolomys O.F., Strelchuk V.V., Dzhahan V.M.,</i> <i>Dubikovskyi O.V.</i> Raman and photoluminescence spectroscopy of laser-induced structural phase transition in polycrystalline VO_2	296
<i>A.V. Duvanskii, M. G. Sosnin, L. I. Khirunenko.</i> Self-interstitials-related radiation defects in Ge	298
<i>I.M. Фодчук, В.Ф. Романкевич, В.В. Довганюк, Т.А. Каземірський, О.В.</i> <i>Сумарюк.</i> Вплив мікрокремнезему та метакаоліну на термостійкість високоміцних композитів	300
<i>Yu.V. Horbatenko, O.A. Korolyuk, M.S. Barabashko, A.I. Krivchikov.</i> Universal empirical relation of the thermal conductivity for disordered materials	302
<i>Horbenko Yu.Yu., Aksimentyeva O.I., Kovalskyi Y.P.</i> Effect of the graphene oxide doping on the electrical properties of poly(6-aminoindole)	304
<i>A. Horvat, A. Molnar, V. Minkovich.</i> Dielectric properties and a. c. conductivity of amorphous Se glass with impurities	306
<i>Z. Zhuchenko, G. Tarasov, A. Zolotovsky, C. Leroux, D. Pelloquin, C. Guillaume,</i> <i>C. Labbé, X. Portier.</i> Structural and morphological modification in annealed rare- earth doped ZnO/Si structures	308
<i>Ткачук І.Г., Іванов В.І., Орлецький І.Г., Ковалюк З.Д.</i> Гетеропереходи на основі шаруватого кристалу InSe з феритовими плівками $ZnFe_2O_4$	310
<i>Kochubei H., Stronski A., Dzhagan V., Shportko K., Shamrovska P., Zahn D.R.T.</i> Structural studies of Ge-Sb-Se alloys	312
<i>Обухова Т.Ю., Семененко М.О., Пилипчук О.С., Кравченко С.О., Остапенко</i> <i>О.Ю., Саріков А.В.</i> Електричний імпеданс плівок меланіну, сформованих методом самоорганізації	314
<i>I.I.Небола, A.B.Корнейчук, A.Ф.Катаниця, Д.І.Кайнц, I.M.Шкирта,</i> <i>O.O. Спесивих.</i> Модельні фононні спектри кристалів з структурою A15	316

<i>A. Grabar, V. Voloshyn, K. Gukhov, A. Kohutych.</i> Optical and photorefractive properties of co-doped $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ ferroelectrics - semiconductors	318
<i>Кузьменко Т.О., Семененко М.О., Кравченко С.О.</i> Варіація ступеню диспергації агрегованих вуглецевих нанотрубок в розчинах з ПВБ	320
<i>O. B. Завгородній, O. Я. Оліх.</i> Застосування моделей комп'ютерного зору до оцінки концентрації заліза у кремнієвих сонячних елементах	322
<i>Замуруєва О.В., Сахнюк В.С., Івановський Ю.В., Романчук О.М.</i> Халькогенідні матеріали з керованими рекомбінаційними властивостями для адаптивних фотонних технологій	324
<i>Voynarovych I.M., Pogodin A.I., Hasynets S.M., Pavley S.I., Gomonnai A.V.</i> Characterization of $(\text{As}_2\text{S}_3)_{1-x}\text{M}_x$ ($\text{M}=\text{Ag}, \text{Bi}$) glasses by DC conductivity	326
<i>Шварц М. М., Шварц Ю. М., Беляев О.Є., Соколов В. М.</i> Вплив магнітного поля на гістерезис вольт-амперних характеристик у кремнієвих n^{++} - p^+ -діодах при температурі рідкого гелію	327
<i>S. Karpus, M. Liashchov, I. Shliakhov, D. Zakharchuk.</i> Work function of secondary electrons from CuAlMg alloy	329
<i>Колупаєв В.О., Морозовська Г.М., Порошин В.М.</i> Моделювання полярних та діелектричних властивостей наночастинок мультифероїків $\text{Bi}_{1-x}\text{Sm}_x\text{FeO}_3$ та CuInP_2S_6	331
<i>O.I. Korolov, L.Yu. Kharkhalis, K.E. Glukhov, T.Ya. Babuka.</i> Comprehensive comparison of energetic, mechanical, and optical characteristics of β -InSe, ϵ -InSe, and γ -InSe polotypes for advanced optoelectronic applications	333
<i>A.A. Крючин, В.В. Петров, С.В. Беляк, І.В. Косяк.</i> Аналіз можливостей прямого лазерного запису з створення структур з субмікронними розмірами	335
<i>O. Kulikova, O. Danilescu, P. Bourosh, Y. Chumakov, M. Cocu, I. Bulhac.</i> Absorption of the wide-gap semiconductors (Fe(III) mononuclear coordination compounds)	337
<i>S.V. Lizunova, G.I. Nizkova, A.O. Bilotcka, T.P. Vladimirova, Ya.V. Vasylyk, O.S. Skakunova, I.I. Demchik, L.I. Makarenko, I.M. Zabolotny, V.V. Molodkin. V.V. Lizunov.</i> X-Ray Dynamical Diffraction of Ion-Implanted Boron Layers in Si	339
<i>R.O. Lysenko, O.V. Pylypova, M.O. Semenenko.</i> Characterization of the structure of melanin grown by the self-organization method using infrared spectroscopy	341
<i>P. Lytvyn, A. Korchovyii, A. Rusavsky, A. Vasin, K. Svezhentsova, V. Dzhagan.</i> Practical Aspects of Single-, Multi-Pulse, and Continuous Wave Laser Micro-/Nano-Structuring of Materials	343
<i>Маланич Г.П., Томашик В.М.</i> Вплив органічного розчинника на хіміко-механічне полірування монокристалів індій стибіду травильними сумішами $\text{I}_2 + \text{HI}$	345

<i>Maziar D.M., Kolomys O.F., Nikolenko A.S., Strelchuk V.V., Alieksandrov M.A., Popenko V.I., Tsybrii Z.F., Melezhyk Ye.O., Lytvyn P.M., Gudymenko O.Yo.</i> Structural and microwave properties of hybrid carbon–iron filled polymer thin-film composites	347
<i>Мельничук О.В., Корсунська Н.О., Мельничук Л.Ю., Хоменкова Л.Ю.</i> Особливості спектрів ІЧ відбивання кераміки на основі ZrO_2 з різною кристалічною структурою	349
<i>Priishlyak O.C., Balabai P.M.</i> Провідність оксиду галію із зменшенням вмісту кисню	351
<i>Bertegel I. Г., Чесноков Е.Д., Овчаренко О. І., Бондар О.В., Буківський А.П., Гнатенко Ю.П.</i> Вплив нанокластерних утворень на спектри ЯКР I^{127} змішаних шаруватих напівпровідників на основі йодидів свинцю і кадмію	353
<i>Klara Verheles, Artur Podhorodecki.</i> Aqueous synthesis and optical properties of CdTe quantum dots with different combinations of MPA and NAC	355
<i>В.Д. Попович, А.В. Попович, І.Д. Столярчук, R. Böttger, R. Heller, P. Dlużewski, W. Zajkowska, A. Zywczał, M. Kuzma.</i> Структура, фазовий склад та магнетизм монокристалів CdTe, імплантованих високими дозами іонів Cr^+	357
<i>Mykhailo Chaika and Paweł Gluchowski.</i> Peculiar Behavior of Cr^{3+} Luminescence in Cr:GGG Transparent Nanoceramics	359
<i>A.V. Uriadov, D.V. Savchenko, I.V. Ivanchenko, N.A. Popenko, B.E. Bekirov, E.N. Kalabukhova.</i> EPR study of paramagnetic to spin-glass transition in $Zn_{1-x}Mn_xSe:Fe^{2+}$ single crystals	360
<i>Тягур Ю.І., Небола І.І.</i> Питома електрична провідність та електричний опір кристалів SbSJ	362
<i>Тужиков А.В., Кавецький Т.С., Ків А.Ю., Соловйов В.М.</i> Інженерія дефектів у графенових квантових точках: підхід на основі машинного навчання	364
<i>V.V. Tetyorkin, A.I. Tkachuk, O.K. Porada.</i> PF and SCL Conduction Mechanisms in Amorphous SiCN Films	366
<i>Свеженцова К.В., Цибрій З.Ф., Сапон С.В., Смолій М.І., Сабов Т.М., Дмитрук Н.Д., Пантелейєв О.Г.</i> Вплив умов сульфідування на хімічний склад поверхні $HgCdTe$ для ІЧ і ТГц приймачів	368
<i>M.O. Сорокатий, В.М. Стребежев, I.M. Юрійчук, Ю.Б. Халавка, Д.А. Бурченко.</i> Оптичні та фотоелектричні елементи на основі In_4Se_3 , модифіковані в області лазерного впливу	370
<i>V. E. Slyntko, L. Kilanski, V. V. Netyaga, S. P. Yurtsevuk, A. V. Zaslonkin.</i> The influence of Mn and Sn ions on critical temperatures T_C and T_g in semimagnetic semiconductors $Ge_{1-x-y}Sn_xMn_yTe$	372

<i>V. Slipokurov, A. Zinovchuk, F. Sizov, Z. Tsybrii, Ye. Melezhyk, Ye. Storozhuk.</i> Investigation of electro-physical properties of Cr/p-Hg _{0.72} Cd _{0.28} Te and Cr/p-CdTe/Hg _{0.72} Cd _{0.28} Te contacts	374
<i>K. Shportko, S. Cremer, A. Lotnyk, I. Maricheva, V. Gorokhov.</i> Thickness-driven optical transformations in GeTe and Sb ₂ Te ₃ ultra-thin films	376
<i>Serhii Shmahlii and Andrey Sarikov.</i> Molecular dynamics simulation study of elastic characteristics of 3C-SiC modified with extended defects	378
<i>I. Shender, Y. Stasiuk, A. Pogodin, M. Filep, T. Malakhovska, V. Bilanych.</i> Microhardness investigation of the monocrystalline Ag _{7+x} (P _{1-x} Ge _x)S ₆ solid solutions	380
<i>М.Я. Рудиши, А.І. Кащуба, І. В. Семків, В.М. Кордан, М. Плясецький, Р.Б. Матвіїв.</i> Дослідження оптичних спектрів кристала BaTeMo ₂ O ₉ з домішкою іонів Cr ³⁺	382
<i>O.V. Pylypova, A.A. Evtukh, A.I. Pylypov, D. Korbutyak, V. Tokarev.</i> Electrophysical properties of polymer films with CdCu nanocrystals	384
<i>Pylypov A.I., A.A. Evtukh, S.V. Antonin, Pylypova O.V., Muryi Ya.Yu., O.L. Bratus.</i> The dielectric losses in MIS structures with SiO _x &Fe _y O _z (Fe) films	386
<i>A.B. Попович, В.Д. Попович, R. Mroczka, P. Sagan, I.Д. Столлярчук, B.P. Карпій, M. Кузта.</i> Дослідження поверхні монокристалічного CdTe, імплантованих іонами хрому	388
<i>О.О. Полубояров, О.М. Чугай, Ю.А. Волошин.</i> Скануюча фотодіелектрична спектроскопія кристалів CdZnTe: нові дані про локалізовані стани носіїв заряду	390
<i>Остапенко О. Ю., Кравченко С.О., Пилипчук О.С., Семененко М.О.</i> Дослідження імпедансу композитної мембрани з ПВБ і наноструктурованого вуглецю	391
<i>Олег Оліх, Іван Куц.</i> Застосування алгоритмів машинного навчання до обчислення рухливості носіїв заряду у кремнії	393
<i>Valentyna Nosenko, Igor Vorona, Volodymyr Trachevsky, Yuriy Zagorodniy, Sergey Okulov, Oksana Isaieva, Volodymyr Yukhymchuk and Larysa Khomenkova.</i> Cu-related paramagnetic centers in Cu and Cu-Y- doped ZrO ₂ ceramics	395
<i>A. Nikolaienko, O. Kapshuchenko, A. Karlash, A. Dmytruk.</i> Photoluminescence of «green» synthesized Ag-In-Se particles in colloidal solution and thin film	397
<i>V. Nicorici, P. Ketrush, D. Grabco, O. Shikimaka.</i> The influence of impurities on the mechanical properties of PbTe and PbSe binary compounds	399
<i>S.G. Nedilko, V. Boyko, V. Borysiuk, V. Chornii, Yu. Hizhnyi, O. Gomenyuk, V. Sheludko, K. Terebilenko.</i> Synthesis, electronic structure, and optical properties of polycrystalline Bi ₂ WO ₆ :xEu	401

<i>O.M. Slobodyan, A.V. Rusavsky, O.I. Gudymenko, V.M. Vlasiuk, A.P. Kostyliov, S.V. Kondratenko, S.I. Tiagulskiy, R. Yatskiv, A.N. Nazarov, D. Flandre.</i> The CuIn _x Ga _{1-x} Se films deposition from granular target with RF magnetron sputtering in a “pulsating arc” mode	403
<i>A. Molnar, H. Bán, D. Gál, V. Gerasimov, A. Horvat.</i> Macroscopic and microscopic polarization of CuInP ₂ S ₆ crystals	405
<i>С.М. Левицький.</i> Технологія отримання та оптичні властивості плівок PbTe, PbSe, PbS/ p-Si(100)	407
<i>Minakova, I.E.; Kamuz, O.M.; Khmil, D.M.; Kretulis, V.S.; Tytarenko, P.O.; Snopok, B.A.</i> Influence of gaseous adsorbate on optical properties of phosphor suspension based on YAG:Ce ³⁺ microcrystals in epoxy resin matrix	409
<i>Rada Savkina, Oleksii Smirnov, Aleksandra Wypych-Puszkarz, H.S. Rahimi Mosafer, and Wojciech Paszkowicz.</i> Dielectric properties and conductivity of vanadate ceramics Ca _{2.5} □ _{0.5} M ₂ V ₃ O ₁₂ (M: Mg, Co, Ni)	411
<i>Kochubei H., Stronski A., Dzhagan V., Shportko K., Selyshchev O., Shamrovska P., Zahn D.R.T.</i> Structural studies of As ₂ S ₃ :Zn glasses	413
<i>С.М. Левицький, В.О. Гринь, В.В. Таранов,</i> Вплив атмосфери на чутливість детектування у лазерних далекомірних системах	415
<i>Rada Savkina, and Oleksii Smirnov.</i> Synthesis and Characterization of TiO ₂ /α-Fe ₂ O ₃ and Fe ₂ O ₃ /WO ₃ Nanostructures for Energy Storage Devices	417
<i>A.N. Nazarov, P.V. Lytvyn, A.A. Korchovyy, V.V. Strelchuk, A.S. Nikolenko, O.M. Slobodyan, S.I. Tyagulskiy, V.M. Dzhagan</i> Laser reduction and maskless laser lithography of Graphene Oxide films on dielectric	419
<i>Коваленко О.В., Ляшков О.Ю., Воровський В.Ю.</i> Дослідження газочутливих властивостей нано- та мікророзмірних матеріалів на основі ZnO	421
<i>Рубіш В.М., Поп М.М., Макар Л.І., Трунов М.Л., Пісак Р.П.</i> Спектри пропускання та параметри модифікованих ртуттю аморфних плівок Se _{100-x} As _x	423
<i>N.V. Mazur, O.A.Kapush, O.F. Isaieva, P.V. Demydov, V.K. Lytvyn V.M. Dzhagan, V.O. Yukhymchuk.</i> Detection of explosive analogue materials by SERS technique	425
<i>Поп М.М., Рубіш В.М., Ясінко Т.І., Дуркот М.О., Трунов М.Л.</i> Еліпсометричні дослідження витриманих в парах ртуті аморфних плівок системи селен-миш'як	427
<i>Рябощук О., Міца А.</i> Моделювання впливу дисперсії показника заломлення плівки TiO ₂ НА спектральні характеристики одношарового інтерференційного покриття на скляній підкладинці	429
<i>Б.В. Кожушко, В.Я. Дегода, Г.П. Подуст, М.В. Бондар.</i> Дослідження тривалої фосфоресценції та релаксації струму провідності кристалів ZnSe високої оптичної якості	431

Для нотаток

Наукове видання

**Х УКРАЇНСЬКА НАУКОВА
КОНФЕРЕНЦІЯ З ФІЗИКИ
НАПІВПРОВІДНИКІВ
УНКФН–10**

Матеріали конференції

У авторській редакції

Підписано до друку 16.05.2025. Формат 60x84/8. Папір офс. Друк.офс.
Гарнітура Times New Roman. Ум. друк.арк. 51,2. Замовлення № 269К. Тираж 300 прим.

ТОВ «PIK-У»: 88006, м. Ужгород, вул. Карпатської України, 36, e-mail: print@rik.com.ua
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 5040 від 21 січня 2016 року

Друк: ФОП Ященко Євген Валерійович
88015, Закарпатська обл., Ужгородський р-н, м. Ужгород,
вул. Героїв 128-ї бригади, буд. 48А, корпус 2, кв. 48

