

Міністерство освіти і науки України
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»



Серія
Фізика

Series
Physics

Випуск
Issue **45**

2019

Журнал засновано у 1997 році та видається за рішенням
Редакційно-видавничої ради Ужгородського національного
університету

Ужгород – 2019

DOI: 10.24144/2415-8038.2019.45

УДК 53 (08)

**Засновником журналу «Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика»
є ДВНЗ «Ужгородський національний університет», фізичний факультет
та Закарпатське фізичне товариство**

Журнал включено в Перелік наукових фахових видань України.

Категорія: Б. Науки: фізико-математичні. Спеціальності: 104 – Фізика та астрономія,
105 – Прикладна фізика та наноматеріали
(Наказ МОН від 11.07.2019 № 975)

Редакційна колегія:

Професор, д.ф.-м.н. В. Різак (головний редактор), професор, д.ф.-м.н. П. Пуга (заступник головного редактора), доцент, к.ф.-м.н. Н. Попович (відповідальний секретар), професор, д.ф.-м.н., член-кор. НАН України Ю. Височанський, професори, д.ф.-м.н. В. Лазур, І. Небола, О. Сливка, І. Студеняк, І. Шафраньош, доценти, к.ф.-м.н. П. Гуранич, М. Карбованець (Ужгородський національний університет), професор, д.ф.-м.н., академік НАН України О. Шпенник (ІЕФ НАН України, м. Ужгород), професори, д.ф.-м.н. Ю. Баніс (Вільнюський університет), М. Зубек (Політехнічний університет, Гданськ, Польща), П. Копчанський (Інститут експериментальної фізики Словацької АН, м. Кошіце), О. Фегер (Інститут фізики, Кошіцький університет ім. Шафарика, Словаччина), В. Матолін (Карлів університет у Празі, Чехія), М. Краньчен (Університет Норд, Вараджін, Хорватія), А. Олеага (Університет країни Басків, м.Більбао, Іспанія), к.ф.-м.н. М. Вереш (Інститут фізики твердого тіла і оптики Вігнеровського фізичного дослідного центру Угорської академії наук, м. Будапешт), М. Гайфулін (Університет Лафборо, Велика Британія), Д.Орлов (Лундський університет, Швеція), Ю. Пігош (Токійський університет, Японія), В. Новосад (Аргонська національна лабораторія, США).

Відповідальний за випуск – к.ф.-м.н., доц. Рубіш В.В.

Редакція – Рубіш В.В.

Тематика журналу «Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика» охоплює:
фізику конденсованих систем, ядерну фізику, атомну та молекулярну фізику, теорію поля та фізику елементарних частинок, астрофізику, фізичну електроніку, прикладну фізику, фізико-технологічні проблеми забезпечення інформаційної безпеки, міждисциплінарну фізику та суміжні галузі науки, техніки, історії фізики, хронологію, персоналії та бібліографію.

**Рекомендовано до друку Вченою Радою ДВНЗ «Ужгородський національний університет»,
протокол № 12 від 19 грудня 2019 р.**

Адреса редакції:

Фізичний факультет УжНУ
вул. Волошина, 54, Ужгород, 88000
Тел. (факс): (03122) 3-20-24
e-mail: visnykuzhnufizyka@gmail.com

Електронна версія: <http://fizyka-visnyk.uzhnu.edu.ua/>

Свідоцтво про державну реєстрацію друкованого засобу масової інформації Серія КВ № 7972, видане
Державним комітетом телебачення і радіомовлення від 09.10.2003 року
ISSN: 2415-8038

Ministry of Education and Science of Ukraine
State University «Uzhhorod National University»



Серія
Фізика

Series
Physics

Випуск
Issue **45**

2019

The journal was founded in 1997 and is published by
the Publishing Council of Uzhhorod National University

Uzhhorod – 2019

DOI: 10.24144/2415-8038.2019.45

УДК 53 (08)

The journal «Scientific Herald of Uzhhorod University. Series «Physics» is founded by Faculty of Physics, State University «Uzhhorod National University» and Transcarpathian Physical Society

The journal is included in the List of Scientific Professional Species of Ukraine.

Category: B. Branch of Sciences: Physics and Mathematics. Specialty: 104 – Physics and Astronomy, 105 – Applied Physics and Nanomaterials

(Order of the Ministry of Education and Science of Ukraine from July 11th, 2019 No. 975)

Editorial board:

Professor Vasyl Rizak (Editor-in-Chief), Professor P. Puha (Deputy Editor-in-Chief), Associate Professor N. Popovich (Executive Secretary), Professors Yu. Vysochanskyi, V. Lazur, I. Nebola, O. Slyvka, I. Studeniak, I. Shafranyosh, Associate Professor P. Guranich, M. Karbovanets (Uzhhorod National University), Academician of Ukrainian National Academy of Science, Professor O. Shpenyk, (Institute of Electron Physics of Ukrainian National Academy of Science, Uzhhorod), Professors J. Banys (Vilnius University), M. Zubek (Gdańsk University of Technology, Poland), P. Kopchans'kyi (Institute of Experimental Physics of Slovak Academy of Science, Košice), V. Matolin (Charles University, Prague, Czech Republic), A. Feher (Pavol Jozef Šafárik in Košice, Slovak Republic), A. Oleaga (University of the Basque Country (UPV/EHU), Bilbao, Spain), M. Kranjčec (University North, Varaždin, Croatia), Associate Professor M. Veres (Institute for Solid State Physics and Optics, Wigner Research Centre for Physics of the H.A.S., Budapest, Hungary), Dr. M. Gaifullin (Loughborough University, United Kingdom), Prof. D. Orlov (Lund University, Sweden), PhD Yu. Pihosh (The University of Tokyo, Japan), Senior Scientist V. Novosad (Argonne National Laboratory, USA).

Editorial notes by PhD V.V. Rubish

The journal «Scientific Herald of Uzhhorod University. Series «Physics» covers the topics: *condensed matter physics, nuclear physics, atomic and molecular physics, field theory and elementary-particle physics, astrophysics, physical electronics, applied physics, interdisciplinary physics and adjacent fields of physics, engineering, history of physics, chronicles, famous personalities and bibliography.*

Recommended to publication by the Scientific Council of the SU «Uzhhorod National University», record No. 12 from December 19th 2019

The address of editorial board:

Faculty of Physics, Uzhhorod National University
Voloshyn Str. 54, Uzhhorod, 88000, Ukraine,
Phone. (fax): (03122) 3-20-24
e-mail: visnykuzhnufizyka@gmail.com

Electronic version: <http://fizyka-visnyk.uzhnu.edu.ua/>

Certificate of State Registration of Printed Mass Media, Series KV № 7972, issued by the State Committee of Radio and TV, November 9th, 2003
ISSN: 2415-8038

© SU «Uzhhorod National University», 2019

Зміст

А. І. Погодін, М. М. Лучинець, М. Й. Філеп, О. П. Кохан, І. П. Студеняк, П. Куш СИНТЕЗ, ВИРОЩУВАННЯ ТА СТРУКТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$	7
О.В. Шуста, П.П. Гуранич, О.Г. Сливка, В.С. Шуста, Р. Нуранч ТЕМПЕРАТУРНА ПОВЕДІНКА КРАЮ ФУНДАМЕНТАЛЬНОГО ПОГЛИНАННЯ КРИСТАЛІВ $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$	14
А. І. Погодін, О. П. Кохан, О. О. Ямковий, Л. М. Сусліков, І. П. Студеняк ЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ СУПЕРІОННИХ ПРОВІДНИКІВ $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$	19
В. М. Рубіш, С. М. Гасинець, О. М. Грещук, Л. І. Макар, О. А. Микайло, Р. П. Пісак, І. М. Різак, А. М. Соломон, В. О. Юхимчук, Т. І. Ясірко СТРУКТУРА СТЕКОЛ І КОМПОЗИТІВ В СИСТЕМІ $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$	27
В. М. Мазур, З. М. Біган, П. С. Деречкей, Д. М. Симочко ДОСЛІДЖЕННЯ ЗБУДЖЕННЯ ІЗОМЕРНОГО СТАНУ $11/2^-$ ЯДРА ^{137}Ba В РЕАКЦІЇ $(\gamma, \gamma')^m$	39
І. В. Пилипчинець, О. О. Парлаг, В. Т. Маслюк, О. І. Лендел, М. І. Романюк, І. Г. Мегела, О. М. Турховський ДВОШАРОВІ МІШЕНІ ДЛЯ ФОРМУВАННЯ ПУЧКІВ ВИСОКОЕНЕРГЕТИЧНИХ ФОТОНІВ НА ЕЛЕКТРОННОМУ ПРИСКОРЮВАЧІ – МІКРОТРОНІ М-30	50
І. А. Хомич, Т. В. Ковалінська, В. І. Сахно РАДІАЦІЙНІ ПРОБЛЕМИ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ВИПРОБУВАНЬ ОБЛАДНАННЯ АЕС НА ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІЙ УСТАНОВЦІ ІЯД НАН УКРАЇНИ	61
В. Ю. Лазур, С. І. Мигалина, О. К. Рейтій, В. В. Рубіш, М. І. Карбованець МАТРИЧНІ ЕЛЕМЕНТИ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ МІЖ ДВОМА ДВОРІВНЕВИМИ АТОМАМИ, РОЗТАШОВАНИМИ НА ДОВІЛЬНІЙ ВІДСТАНІ ОДИН ВІД ОДНОГО	73
А. І. Гайсак, І. І. Гайсак СИНГУЛЯРНИЙ РОЗВ'ЯЗОК РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА ДЛЯ АТОМА ВОДНЮ	85
В. М. Симулик, Т. М. Заяць РІЗНОМАНІТТЯ ПІДХОДІВ ДО ПИТАННЯ ПРО ВИВЕДЕННЯ РІВНЯННЯ ДІРАКА	92
М. Я. Євич, М. І. Карбованець ПЕРЕЗАРЯДКА У ДВІЧІ ЗБУДЖЕНІ СТАНИ ПРИ ПОВІЛЬНИХ ІОН-МОЛЕКУЛЯРНИХ ЗІТКНЕННЯХ	104
В. М. Симулик, Т. М. Заяць ОПИС ПОЗДОВЖНИХ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ХВИЛЬ РІВНЯННЯМИ МАКСВЕЛЛА	116
Н. Бенце, О. І. Лендел, З. З. Торич МОДЕЛІ ПОМЕРОНА ПРИ ЕНЕРГІЯХ ВАК	125
В. І. Кудак, Л. С. Шакур, В. М. Періг, В. Є. Саваневич ПОРІВНЯННЯ ТОЧНОСТЕЙ ПОЛОЖЕНЬ ГЕОСИНХРОННИХ ОБ'ЄКТІВ РІЗНИМ ПРОГРАМНИМ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯМ	134
О. М. Кожухов, С. В. Рищенко, Т. О. Дементьєв, В. П. Єпішев, І. І. Мотрунич, І. Ф. Найбауер, В. М. Періг, В. І. Кудак, Д. М. Кожухов, О. М. Піскун ОЦІНКА СТАНУ КОСМІЧНИХ АПАРАТІВ ТИПУ CUBESAT ЗА ОПТИЧНИМИ СПОСТЕРЕЖЕННЯМИ (НА ПРИКЛАДІ КА ARKYD 6A)	141

Content

A. I. Pogodin, M. M. Luchynets, M. Y. Filep, O. P. Kokhan, I. P. Studenyak, P. Kúš SYNTHESIS, GROWTH AND STRUCTURAL PROPERTIES OF $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ SOLID SOLUTIONS	7
A. V. Shusta, P. P. Guranich, A. G. Slivka, V. S. Shusta, P. Huranych TEMPERATURE BEHAVIOR OF ABSORPTION EDGE OF $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ LAYERED CRYSTALS	14
A. I. Pogodin, O. P. Kokhan, O. O. Yamkovi, L. M. Suslikov, I. P. Studenyak ELECTRICAL PROPERTIES OF COMPOSITES BASED ON SOLID SOLUTIONS OF $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$ SUPERIONIC CONDUCTORS	19
V. M. Rubish, S. M. Hasynets, O. M. Hreshchuk, L. I. Makar , O. A. Mykaylo, R. P. Pisak, I. M. Rizak, A. M. Solomon, V. O. Yukhymchuk, T. I. Yasinko STRUCTURE OF GLASSES AND COMPOSITES IN $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ SYSTEM	27
V. M. Mazur, Z. M. Bigan, P. S. Derechkei, D. M. Symochko INVESTIGATION OF THE $11/2^-$ ISOMERIC STATE EXCITATION OF THE ^{137}Ba NUCLEUS IN THE $(\gamma, \gamma')^m$ REACTION	39
I. V. Pylypchynets, O. O. Parlag, V. T. Masluyk, A. I. Lengyel, M. I. Romanyuk, I. G. Megela, O. M. Tyrchovsky DOUBLE-LAYER TARGETS FOR FORMING THE BEAMS OF THE HIGH-ENERGY PHOTONS ON THE ELECTRON ACCELERATOR OF M-30 MICROTRON	50
I. A. Khomych, T. V. Kovalinska, V. I. Sakhno RADIATION PROBLEMS OF FUNCTIONAL TESTING OF NUCLEAR POWER PLANT EQUIPMENT AT AN ELECTROPHYSICAL INSTALLATION OF THE INR OF NAS OF UKRAINE	61
V. Yu. Lazur, S. I. Myhalyna, O. K. Reity, V. V. Rubish, M. I. Karbovanets MATRIX ELEMENTS OF THE DIPOLE-DIPOLE INTERACTION BETWEEN TWO TWO-LEVEL ATOMS DISTANCED ARBITRARILY FROM EACH OTHER	73
A. I. Haysak, I. I. Haysak ON THE SINGULAR SOLUTION OF SCHRÖDINGER EQUATION FOR THE HYDROGEN ATOM	85
V. M. Simulik, T. M. Zajac THE VARIETY OF APPROACHES TO THE PROBLEM OF THE DERIVATION OF DIRAC EQUATION	92
M. Ya. Yevych, M. I. Karbovanets CHARGE-TRANSFER PROCESSES INTO DOUBLY EXCITED STATES IN A SLOW ION-MOLECULE COLLISIONS	104
V. M. Simulik, T. M. Zajac DESCRIPTION OF THE LONGITUDINAL ELECTROMAGNETIC WAVES BY THE MAXWELL EQUATIONS	116
N. Bence, A. I. Lengyel, Z. Z. Tarics POMERON MODELS AT LHC ENERGIES	125
V. I. Kudak, L. S. Shakun, V. M. Perig, V. E. Savanevych COMPARISON OF THE GEOSYNCHRONOUS OBJECTS POSITION ACCURACY WITH DIFFERENT SOFTWARE	134
O. M. Kozhukhov, S. V. Rishchenko, T. A. Dementiev, V. P. Yepishev, I. I. Motrunich, I. F. Neubauer, V. M. Perig, V. I. Kudak, D. M. Kozhukhov, O. M. Piskun STATE IDENTIFICATION OF CUBESAT-TYPE SATELLITES BY OPTICAL OBSERVATIONS (ON THE EXAMPLE OF ARKYD 6A SPACECRAFT)	141

УДК 538.951, 531.7
PACS 61.43.Fs, 62.25.+g, 68.60.Bs, 81.07.-b
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.7-13

А.І. Погодін¹, М.М. Лучинець¹, М.Й. Філеп¹, О.П. Кохан¹, І.П. Студеняк¹,
П. Куш²

¹Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54, Україна,
e-mail: studenyak@dr.com

²Університет ім. Коменського, Млинська долина, 84248, Братіслава, Словачія

СИНТЕЗ, ВИРОЩУВАННЯ ТА СТРУКТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ (Cu_{1-x}Ag_x)₇GeSe₅I

Проведено синтез та вирощування монокристалів твердих розчинів (Cu_{1-x}Ag_x)₇GeSe₅I. Рентгеноструктурні дослідження показали, що у системі Cu₇GeSe₅I-Ag₇GeSe₅I утворюється неперервний ряд твердих розчинів (Cu_{1-x}Ag_x)₇GeSe₅I, які кристалізуються в гранецентрованій кубічній комірці. Встановлено, що концентраційна зміна параметра ґратки відбувається у відповідності до закону Вегарда.

Ключові слова: тверді розчини, синтез, вирощування, дифрактограма, параметр ґратки.

Вступ

Кристали Cu₇GeSe₅I та Ag₇GeSe₅I належать до сполук зі структурою аргіродита [1, 2]. Одержанню та дослідженню деяких фізико-хімічних властивостей кристалів Cu₇GeSe₅I, Cu₇GeSe₅I та твердих розчинів на їх основі Cu₇Ge(S_{1-x}Se_x)₅I присвячено кілька робіт [3–5]. Електричні, електрохімічні та оптичні властивості вищезгаданих кристалів досліджувалися в роботах [6–8]. Виявилося, що кристали Cu₇GeSe₅I характеризуються найвищим значенням електричної провідності серед відомих мідевмісних суперіонних провідників (0.64 См/см на частоті 10⁶ Гц та при температурі 300 К) [7]. Крім того, в кристалах Cu₇GeSe₅I та твердих розчинах Cu₇Ge(S_{1-x}Se_x)₅I встановлено зростання електричної провідності з підвищенням температури у відповідності до закону Арреніуса, що свідчить про її термоактиваційну природу. Оптичні дослідження показали, що в кристалах Cu₇GeSe₅I та твердих розчинах Cu₇Ge(S_{1-x}Se_x)₅I спостерігається урбахівська форма краю поглинання, яка визначається сильною електрон-фононою взаємоді-

єю, причому край поглинання зазнає суттєвого впливу композиційного розупорядкування кристалічної ґратки [6–8]. Нарешті, при аніонному заміщенні S → Se у кристалах твердих розчинів Cu₇Ge(S_{1-x}Se_x)₅I виявлено нелінійне збільшення електричної провідності більш, ніж на порядок, нелінійне зменшення ширини оптичної псевдощілини та характерну для твердих розчинів поведінку урбахівської енергії [6–8].

У випадку кристала Ag₇GeSe₅I спостерігається неарреніусівська поведінка електропровідності, а величина електричної провідності при температурі 298 К складає 7.96 × 10⁻² См/см [9–12]. Неарреніусівська поведінка електричної провідності в роботі [10] описується за допомогою співвідношення Фогеля-Фулчера-Тамана, причому її зміни з температурою в кристалі Ag₇GeSe₅I пов'язуються з наявністю «квазі-рідинної» підґратки іонів Ag⁺. Метою даної роботи було синтез та вирощування, рентгеноструктурні дослідження, дослідження концентраційної поведінки параметра ґратки та густини твердих розчинів (Cu_{1-x}Ag_x)₇GeSe₅I.

Методика експерименту

Монокристали тетрарних сполук $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ та твердих розчинів на їх основі $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ з $x = 0; 0.25; 0.5; 0.75; 1$ вирощено методами спрямованої кристалізації ($\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$) та зонної кристалізації $((\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I})$ з розплаву з використанням модифікованої методики.

Специфікою модифікованої методики вирощування монокристалів у випадку одержання індивідуальних сполук, є те, що в ростову ампулу завантажують вихідні прості речовини Ag (99,999%), Cu (99,999%), Ge (99,9999%), Se (99,9999%) та попередньо синтезований CuI (AgI) у відповідних стехіометричних співвідношеннях, додатково очищені методом вакуумної дистиляції (CuI) та методом спрямованої кристалізації з розплаву (AgI). В якості вихідних речовин для синтезу та подальшого вирощування монокристалів твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ використовували попередньо синтезовані тетрарні сполуки $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$. Структурні дослідження проводилися методами диференційного термічного аналізу (хромель-алюмелеві термопари, швидкість нагрівання та охолодження 700 K/год) та рентгенофазового аналізу (ДРОН 4-07, випромінювання $\text{CuK}\alpha$, швидкість сканування кута $2\theta - 0.02$ град, експозиція – 1 с). Аналіз дифрактограм монокристалів проводився з використанням програми EXPO 2014 [13, 14].

Результати та їх обговорення

Режим синтезу та вирощування монокристалів як індивідуальних сполук $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$, так і твердих розчинів на їх основі $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ методом спрямованої кристалізації із розплаву складається з декількох етапів. На першому етапі проводиться синтез $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$. При цьому температура підвищується до 873 K протягом 6 годин. Після цього здійснюється 24-годинна витримка, що пов'язано з необхідністю повного зв'язування селену (для тетрарних сполук $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$), а швидке підвищення температури може при-

звести до розгерметизації ампули. Далі відбувається підвищення температури протягом доби до максимальних значень температури, що на 50 K вище температур плавлення та 24-годинна витримка, при якій відбувається повна гомогенізація розплаву. Подальше пониження до температури гомогенізуючого відпалу, що складає $2/3$ від температури плавлення (72 год) відбувається з швидкістю 100 K/год. Охолодження до кімнатної температури проводять в режимі виключеної печі. З метою встановлення близьких до оптимальних технологічних режимів вирощування монокристалів як індивідуальних сполук $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$, так і твердих розчинів на їх основі $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ з $x = 0; 0.25; 0.5; 0.75; 1$, одержані зразки досліджувалися методом диференційного термічного аналізу (ДТА). Дані ДТА та режими вирощування монокристалів наведені у таблиці 1, де $T_{\text{кр}}$ – температура кристалізації, $T_{\text{пл}}$ – температура плавлення, $T_{\text{зр}}$ – температура зони розплаву, $T_{\text{зв}}$ – температура зони відпалу. Час вирощування індивідуальних сполук та твердих розчинів складав 150 год.

Табл. 1: Технологічні умови вирощування монокристалів твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$

Склад	$T_{\text{кр}}$ (K)	$T_{\text{пл}}$ (K)	$T_{\text{зр}}$ (K)	$T_{\text{зв}}$ (K)
$\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$	1062	1062	1112	710
$(\text{Cu}_{0.75}\text{Ag}_{0.25})_7\text{GeSe}_5\text{I}$	1067	1083	1133	720
$(\text{Cu}_{0.5}\text{Ag}_{0.5})_7\text{GeSe}_5\text{I}$	1072	1094	1144	730
$(\text{Cu}_{0.25}\text{Ag}_{0.75})_7\text{GeSe}_5\text{I}$	1085	1106	1156	735
$\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$	1113	1113	1163	745

Вирощування монокристалів складів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ з $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ включає в себе формування монокристалічного «зародку», методом збірної рекристалізації, в нижній конусоподібній частині ростового контейнеру (48 годин). Швидкість переміщення фронту кристалізації складала 0.4 мм/год. Після переміщення ампули з кристалом у зону відпалу здійснюється гомогенізуючий відпал протягом 3 діб, необхідний для зняття термічних напруг в кристалах. Таким чином були одержані монокристали складу $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) довжиною 20 – 40 мм і діаметром 10 – 15 мм (рис. 1).

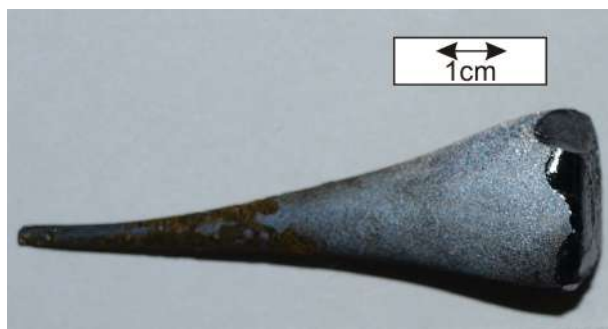


Рис. 1: Зображення кристалу твердого розчину $(\text{Cu}_{0.5}\text{Ag}_{0.5})_7\text{GeSe}_5\text{I}$.

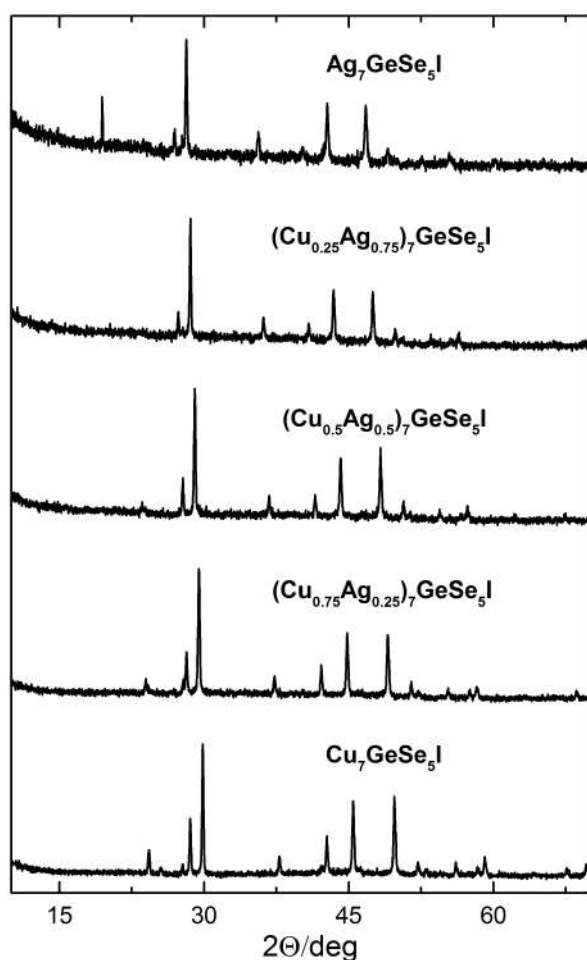


Рис. 2: Дифрактограми твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$).

За результатами рентгенофазового аналізу проведено розрахунки параметрів елементарної комірки сполук $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ і $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ та твердих розчинів на їх основі. Дифрактограми сполук $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ і $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ проіндексовані в гранецентрований кубічний комірки (рис. 2). Кількість і характер рефлексів на дифрактограмах твердих розчинів вказують на те, що в системі

утворюється неперервний ряд твердих розчинів. Повнопрофільний аналіз дифрактограми твердого розчину $(\text{Cu}_{0.5}\text{Ag}_{0.5})_7\text{GeSe}_5\text{I}$ наведено на рис. 3.

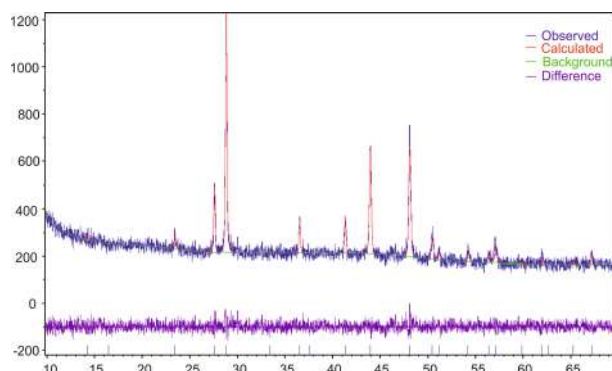


Рис. 3: Експериментальна, розрахована та різницева дифрактограма твердого розчину $(\text{Cu}_{0.5}\text{Ag}_{0.5})_7\text{GeSe}_5\text{I}$.

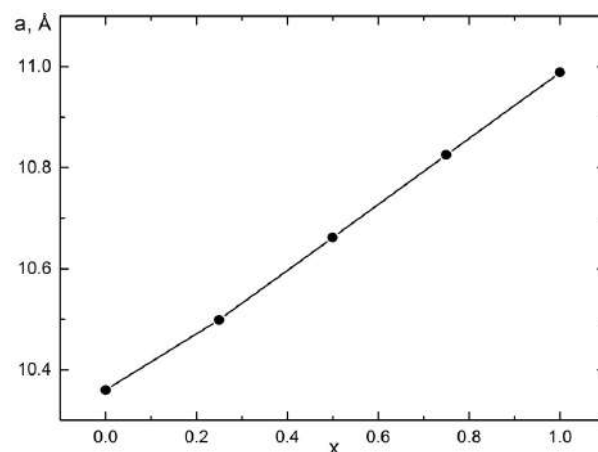


Рис. 4: Концентраційна залежність параметра ґратки твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$.

На рис. 4 наведено концентраційну залежність параметра ґратки для твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$. Зі збільшенням вмісту срібла спостерігається лінійне збільшення параметра кубічної ґратки. Виявлений лінійний характер концентраційної залежності (рис. 4) свідчить про те, що вона описується правилом Вегарда. На основі одержаних значень параметра кубічної ґратки було побудовано концентраційну залежність розрахункової густини твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$, яка наведена на рис. 5. Встановлено, що зі збільшенням вмісту срібла в твердих розчинах $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ спостерігається нелінійне збільшення їх густини. Слід зазначити,

що утворення неперервного ряду твердих розчинів (заміщення $\text{Cu}^+ \leftrightarrow \text{Ag}^+$) відбувається в зв'язку з ізоструктурністю сполук та близькими значеннями іонних радіусів (0,98 Å для Cu^+ та 1,13 Å для Ag^+) [15].

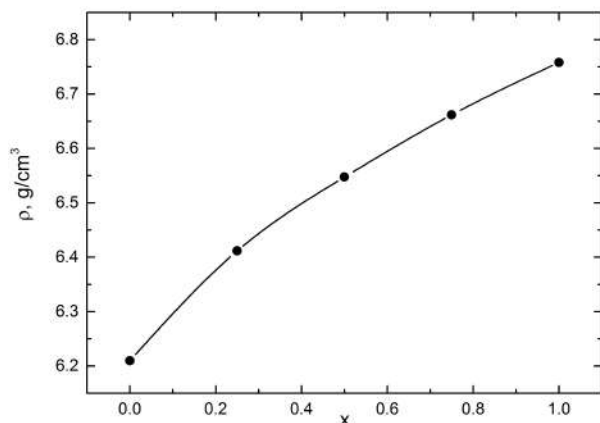


Рис. 5: Концентраційна залежність розрахункової густини твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$.

Висновки

Проведено синтез та вирощування монокристалів твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$. Вирощування монокристалів твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ проводилося кристалізацією з розчину-розплаву. З використанням методу ДТА встановлено близькі до оптимальних технологічні режими вирощування монокристалів твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$). За результатами РФА встановлено, що в системі $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I} - \text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ утворюється неперервний ряд твердих розчинів. Побудовано концентраційну залежність параметру ґратки, яка описується правилом Вегарда. Зі збільшенням вмісту срібла спостерігається лінійне збільшення параметра кубічної ґратки та нелінійне збільшення густини. Утворення неперервного ряду твердих розчинів відбувається в зв'язку з ізоструктурністю тетрамерних сполук структури аргіродиту.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Kuhs W.F. The argyrodites – a new family of the tetrahedrally close-packed structures / W.F. Kuhs, R. Nitsche, K. Scheunemann // Mater. Res. Bull. – 1979. – V. 14. – P. 241–248.
- [2] Nilges T. A structural differentiation of quaternary copper argyrodites: Structure – property relations of high temperature ion conductors / T. Nilges, A. Pfitzner // Z. Kristallogr. – 2005. – V. 220. – P. 281–294.
- [3] Стасюк Ю.М. Одержання і деякі властивості сполук $\text{Cu}_7\text{GeS}_5\text{I}$ та $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ / Ю.М. Стасюк, О.П. Кохан, В.В. Панько, С.К. Ковач // Вісник Ужгородського університету. Сер. Хімія. – 1999. – №4. – С. 9–12.
- [4] Tamm Y. Crystal growth of argyrodite-type phases $\text{Cu}_{8-x}\text{GeS}_{6-x}\text{I}_x$ and $\text{Cu}_{8-x}\text{GeSe}_{6-x}\text{I}_x$ ($0 \ll x \ll 0.8$) / Y. Tamm, S. Schorr, S. Fiechter // J. Cryst. Growth. – 2008. – V. 310. – P. 2215–2221.
- [5] Studenyak I.P. Influence of S→Se substitution on chemical and physical properties of $\text{Cu}_7\text{Ge}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_5\text{I}$ superionic solid solutions / I.P. Studenyak, O.P. Kokhan, M. Kranjčec, V.V. Bilanchuk, V.V. Panko // J. Phys. Chem. Solids. – 2007. – V. 68. – P. 1881–1884.
- [6] Studenyak I.P. Electrical conductivity, electrochemical and optical properties of $\text{Cu}_7\text{GeS}_5\text{I}$ – $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ superionic solid solutions / I.P. Studenyak, V.V. Bilanchuk, O.P. Kokhan, Yu.M. Stasyuk, A.F. Orliukas, A. Keziosis, E. Kazakevicius, T. Salkus // Lit. J. Phys. – 2009. – V. 49, N 2. – P. 203–208.
- [7] Studenyak I.P. Temperature variation of electrical conductivity and absorption edge in $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ advanced superionic conductor / I.P. Studenyak, M. Kranjčec, V.V. Bilanchuk ,

O.P. Kokhan, A.F. Orliukas, E. Kazakevicius, A. Kezionis, T. Salkus // J. Phys. Chem. Solids. – 2009. – V. 70. – P. 1478–1481.

- [8] Studenyak I.P. Temperature and compositional behaviour of electrical conductivity and optical absorption edge in $\text{Cu}_7\text{Ge}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_5\text{I}$ mixed superionic crystals / I.P. Studenyak, M. Kranjčec, V.V. Bilanchuk, O.P. Kokhan, A.F. Orliukas, A. Kezionis, E. Kazakevicius, T. Salkus // Solid State Ionics. – 2010. – V. 181. – P. 1596–1600.
- [9] Laqibi M. New silver superionic conductors $\text{Ag}_7\text{XY}_5\text{Z}$ ($\text{X}=\text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$; $\text{Y}=\text{S}, \text{Se}$; $\text{Z}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) – synthesis and electrical properties / M. Laqibi, B. Cros, S. Peytavin, M. Ribes // Solid State Ionics. – 1987. – V. 23. – P. 21–26.
- [10] Zerouale A. Electrical properties of $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ / A. Zerouale, B. Cros, B. Deroide, M. Ribes // Solid State Ionics. – 1988. – V. 28–30. – P. 1317–1318.
- [11] Belin R. Ion dynamics in the argyrodite compound $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$: non-Arrhenius behavior and complete conductivity spectra / R. Belin, A. Zerouale, A. Pradel, M. Ribes // Solid State Ionics. – 2001. – V. 143. – P. 445–455.
- [12] Belin R. Crystal structure of the non-stoichiometric argyrodite compound $\text{Ag}_{7-x}\text{GeSe}_5\text{I}_{1-x}$ ($x = 0.31$). A highly disordered silver superionic conducting material / R. Belin, L. Aldon, A. Zerouale, C. Belin, M. Ribes // Solid State Sciences. – 2001. – V. 3. – P. 251–265.
- [13] Rietveld H.M. A Profile Refinement Method for Nuclear and Magnetic Structures / H.M. Rietveld // J. Appl. Crystallogr. – 1969. – V. 2. – P. 65–71.
- [14] McCusker L.B. Rietveld refinement guidelines / L.B. McCusker, R.B. Von Dreele, D.E. Cox, D. Louër, P. Scardi // J. Appl. Crystallogr. – 1999. – V. 32. – P. 36–50.
- [15] Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия / В.С. Урусов. – Москва: Изд-во МГУ, 1987. – 275 с.

Стаття надійшла до редакції 25.06.2019

А.И. Погодин¹, М.М. Лучинец¹, М.Й. Филеп¹, О.П. Кохан¹, И.П. Студеняк¹, П. Куш²

¹Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54, Украина,
e-mail: studenyak@dr.com

²Университет им. Коменского, Млинская долина, 84248, Братислава, Словакия

СИНТЕЗ, ВЫРАЩИВАНИЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$

Проведены синтез и выращивание монокристаллов твердых растворов $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$. Рентгеноструктурные исследования показали, что в системе $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I} - \text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ образуется непрерывный ряд твердых растворов $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$, которые кристаллизуются в гранецентрированной кубической ячейке. Показано,

что концентрационное изменение параметра решетки происходит в соответствии с законом Вегарда.

Ключевые слова: твердые растворы, синтез, выращивание, дифрактограмма, параметр решетки.

A.I. Pogodin¹, M.M. Luchynets¹, M.Y. Filep¹, O.P. Kokhan¹, I.P. Studenyak¹,
P. Kúš²

¹Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voshyna Str., 54, Ukraine, e-mail: studenyak@dr.com

²Comenius University, Mlynska dolina, 84248, Bratislava, Slovakia

SYNTHESIS, GROWTH AND STRUCTURAL PROPERTIES OF $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ SOLID SOLUTIONS

Purpose. The purpose of this work was synthesis and crystal growth, X-ray diffraction studies, investigating the compositional behavior of the lattice parameter and the density of $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ solid solutions.

Methods. Single crystals of quaternary compounds with argyrodite structure $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ and solid solutions on their basis $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ with $x = 0; 0.25; 0.5; 0.75; 1$ were grown by direct crystallization ($\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$) and zone crystallization ($(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$) from the melt using a modified method. Structural studies were carried out by the methods of differential thermal analysis (chromel-alumel thermocouples, heating and cooling speed 700 K/h) and X-ray phase analysis (DRON 4-07, $\text{CuK}\alpha$ radiation, scan angle speed $2\theta - 0.02$ deg, exposure – 1 s).

Results. In order to establish near-optimal technological regimes for the growth of single crystals as both individual compounds of $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ and $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$, and solid solutions on their basis $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ they were investigated by the method of differential thermal analysis. The diffraction patterns of $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ and $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ compounds are indexed in a face-centered cubic lattice. The number and nature of the reflexes on diffractograms of solid solutions indicate that a continuous series of solid solutions is formed in the system. The compositional dependence of the lattice parameter was constructed, which is described by Vegard law. As the content of silver increases, a linear increase in the cubic lattice parameter and a nonlinear increase in density are observed.

Conclusions. Synthesis and growth of single crystals of $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ solid solutions was performed. The growth was carried out by the methods of direct crystallization ($\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$) and zone crystallization ($(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$) from the melt using a modified method. According to the results of X-ray diffraction studies, it is established that in $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I} - \text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ system a continuous series of solid solutions is formed. The compositional dependences of the lattice parameter and density are constructed. It was found out that with increasing silver content, a linear increase in the cubic lattice parameter and a nonlinear increase in density in $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{GeSe}_5\text{I}$ solid solutions are observed.

Keywords: solid solutions, synthesis, growth, diffractogram, lattice parameter.

REFERENCES

- [1] Kuhs, W.F., Nitsche, R., Scheunemann, K. (1979), «The argyrodites – a new family of the tetrahedrally close-packed structures», Mater. Res. Bull., V. 14, pp. 241–248.
- [2] Nilges, T., Pfitzner, A. (2005), «A structural differentiation of quaternary copper argyrodites: Structure – property relations of high temperature ion conductors», Z. Kristallogr., V. 220, pp. 281–294.
- [3] Stasyuk, Yu.M., Kokhan, O.P., Panko, V.V., Kovach, S.K. (1999), «Preparation and some properties of $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ and $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ compounds» [«Oderzhannia i deiaki vlastyvoli spoluk $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ ta $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ »], Scientific Bulletin of the Uzhgorod University. Series Chemistry [Nauk. Visn. Uzhgorod. Univ. Ser. Him.], No 4, pp. 9–12.

- [4] Tomm, Y., Schorr, S., Fiechter, S. (2008), «Crystal growth of argyrodite-type phases $\text{Cu}_{8-x}\text{GeS}_{6-x}\text{I}_x$ and $\text{Cu}_{8-x}\text{GeSe}_{6-x}\text{I}_x$ ($0 \ll x \ll 0.8$)», J. Cryst. Growth., V. 310, pp. 2215–2221.
- [5] Studenyak, I.P., Kokhan, O.P., Kranjčec, M., Bilanchuk, V.V., Panko, V.V. (2007), «Influence of S→Se substitution on chemical and physical properties of $\text{Cu}_7\text{Ge}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_5\text{I}$ superionic solid solutions», J. Phys. Chem. Solids, V. 68, pp. 1881–1884.
- [6] Studenyak, I.P., Bilanchuk, V.V., Kokhan, O.P., Stasyuk, Yu.M., Orliukas, A.F., Kezionis, A., Kazakevicius, E., Salkus, T. (2009), «Electrical conductivity, electrochemical and optical properties of $\text{Cu}_7\text{GeS}_5\text{I}$ - $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ superionic solid solutions», Lit. J. Phys., V. 49, N 2, pp. 203–208.
- [7] Studenyak, I.P., Kranjčec, M., Bilanchuk, V. V., Kokhan, O.P., Orliukas, A.F., Kazakevicius, E., Kezionis, A., Salkus, T. (2009), «Temperature variation of electrical conductivity and absorption edge in $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ advanced superionic conductor», J. Phys. Chem. Solids, V. 70, pp. 1478–1481.
- [8] Studenyak, I.P., Kranjčec, M., Bilanchuk, V. V., Kokhan, O.P., Orliukas, A.F., Kezionis, A., Kazakevicius, E., Salkus, T. (2010), «Temperature and compositional behaviour of electrical conductivity and optical absorption edge in $\text{Cu}_7\text{Ge}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_5\text{I}$ mixed superionic crystals», Solid State Ionics, V. 181, pp. 1596–1600.
- [9] Laqibi, M., Cros, B., Peytavin, S., Ribes, M. (1987), «New silver superionic conductors $\text{Ag}_7\text{XY}_5\text{Z}$ ($\text{X} = \text{Si, Ge, Sn}$; $\text{Y} = \text{S, Se}$; $\text{Z} = \text{Cl, Br, I}$) – synthesis and electrical properties», Solid State Ionics, V. 23, pp. 21–26.
- [10] Zerouale, A., Cros, B., Deroide, B., Ribes, M. (1988), «Electrical properties of $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ », Solid State Ionics, V. 28–30, pp. 1317–1318.
- [11] Belin, R., Zerouale, A., Pradel, A., Ribes, M. (2001), «Ion dynamics in the argyrodite compound $\text{Ag}_7\text{GeSe}_5\text{I}$: non-Arrhenius behavior and complete conductivity spectra», Solid State Ionics, V. 143, pp. 445–455.
- [12] Belin, R., Aldon, L., Zerouale, A., Belin, C., Ribes, M. (2001), «Crystal structure of the non-stoichiometric argyrodite compound $\text{Ag}_{7-x}\text{GeSe}_5\text{I}_{1-x}$ ($x = 0.31$). A highly disordered silver superionic conducting material», Solid State Sciences, V. 3, pp. 251–265.
- [13] Rietveld, H.M. (1969), «A Profile Refinement Method for Nuclear and Magnetic Structures», J. Appl. Crystallogr., V. 2, pp. 65–71.
- [14] McCusker, L.B., Von Dreele, R.B., Cox, D.E., Louër, D., Scardi, P. (1999), «Rietveld refinement guidelines», J. Appl. Crystallogr., V. 32, pp. 36–50.
- [15] Urusov, V.S. (1987), Theoretical Crystal Chemistry [Teoretycheskaia krystallokhymia], Nauka, Moscow, 275 p.

УДК 535.343.2, 538.911
PACS 78.20.Ci, 77.80.-e
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.14-18

О.В. Шуста, П.П. Гуранич, О.Г. Сливка, В.С. Шуста, Р. Huranych

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54, Україна,
 e-mail: pavlo.guranich@uzhnu.edu.ua

ТЕМПЕРАТУРНА ПОВЕДІНКА КРАЮ ФУНДАМЕНТАЛЬНОГО ПОГЛИНАННЯ КРИСТАЛІВ $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$

Досліджено спектри оптичного поглинання шаруватих кристалів $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ в температурному інтервалі 150 – 350 К. Виявлено, що край фундаментального поглинання має експоненціальний характер і підкоряється правилу Урбаха. Визначено параметри правила Урбаха та температурний коефіцієнти зсуву енергетичного положення краю поглинання в досліджуваних кристалах.

Ключові слова: сегнетоелектрики, фазові переходи, спектри поглинання.

Вступ

Шаруваті кристали типу CuInP_2S_6 являються цікавими об'єктами для експериментальних досліджень так як володіють різними типами дипольного впорядкування і на фазових діаграмах яких реалізуються фазові переходи в сегнето-, сегнети-, антисегнети-, неспівмірні фази та фази дипольного скла.

Крім того, зростання інтересу до них викликано результатами робіт [1, 2], де було показано, що шаруваті ультратонкі зразки кристалів CuInP_2S_6 та CuCrP_2S_6 можна використати в якості наступного покоління енергонезалежних запам'ятовуючих пристроїв пам'яті та різних vdW гетероструктур, заснованих на 2D-сегнетоелектриках.

В роботах [3, 4] показано, що сегнетоелектрична поляризація при атмосферному тиску та температурі $T_c = 313$ К в кристалах CuInP_2S_6 виникає в результаті фазового переходу (ФП) першого роду типу «лад – безлад», перпендикулярно шарам і обумовлена антиколінеарними вкладками за рахунок впорядкування іонів міді і зміщення іонів індію. При зміні хімічного складу твердих розчинів $\text{CuCr}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_2\text{S}_6$ можна спостерігати трансформацію від дипольного упорядкування з

дальнім порядком в сегнетоелектричне для кристалів CuInP_2S_6 чи антисегнетоелектричне для кристалів CuCrP_2S_6 до стану дипольного скла з відповідною релаксаційною поведінкою, обумовленою «заморожуванням» сегнетоактивних іонів в кристалічній ґратці. Ізоморфна заміна атомів In на атоми Cr суттєво знижує температуру сегнетоелектричного фазового переходу. Згідно фазової x, T-діаграми для кристалів $\text{CuCr}_x\text{In}_{1-x}\text{P}_2\text{S}_6$ вона виявилася рівною $T_c = 220$ К та $T_c = 245$ К відповідно для $x = 0,3$ та $0,2$ мол. дол. [5]. При цьому в даних кристалах спостерігається суттєве розмиття фазового переходу. Інформацію про ФП та ефекти розупорядкування в кристалах можна одержати із температурних досліджень краю оптичного поглинання світла. Метою даної роботи було дослідження краю фундаментального поглинання в кристалах $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$.

Методика експерименту

Кристали $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ вирощені за допомогою методу хімічних транспортних реакцій. Для вимірювань використовувалися зразки товщиною 40 – 80 мкм. Температура зразка контролювалась мідь-

константовою термопарою з точністю 0,1 К. Спектр поглинання досліджували за допомогою спектрометра USB400 фірми «Ocean optics» з діапазоном реєстрації довжини хвиль 190 – 1100 нм.

Експериментальні результати

На рис. 1 наведені зображення поверхні квазидвовимірних монокристалів $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ отримані за допомогою скануючого електронного мікроскопі JSM-7001FSEM і проведено їх точковий аналіз методом енергодисперсійної рентгенофлуоресцентної спектроскопії. Отриманий хімічний аналіз кристалів показав, що їх склад складає: Cu – 15,36 моль. %; In 19,46 моль. %; Cr – 3,72 моль. %; P – 15,95 моль. %; S – 46,51 моль. %, що дуже добре узгоджується із теоретичними розрахунками.

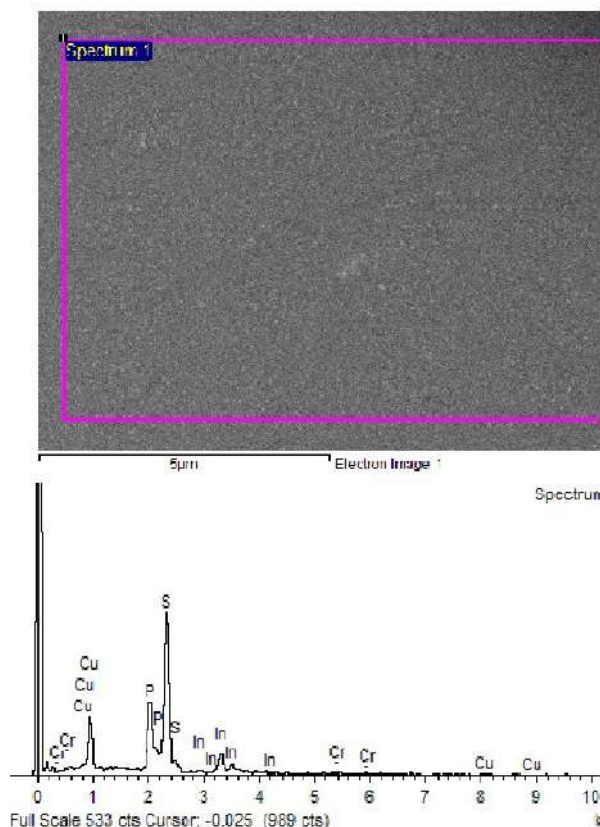


Рис. 1: Зображення поверхні та рентгенофлуоресцентний EDX-спектр шаруватих кристалів $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$.

Спектральні залежності коефіцієнта поглинання кристалів $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ для

різних температур наведені на рис. 2. Виявлено, що у досліджуваному інтервалі температур край поглинання має експоненціальну форму.

Спектральні залежності коефіцієнта поглинання, в напівлогарифмічному масштабі для різних температурних областей наведені на рис. 3.

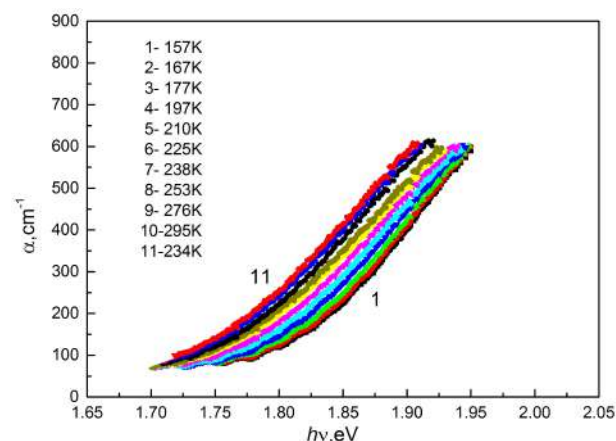


Рис. 2: Спектральні залежності коефіцієнта поглинання кристала $\text{Cu}(\text{Cr}_{0.3}\text{In}_{0.7})\text{P}_2\text{S}_6$ при різних температурах.

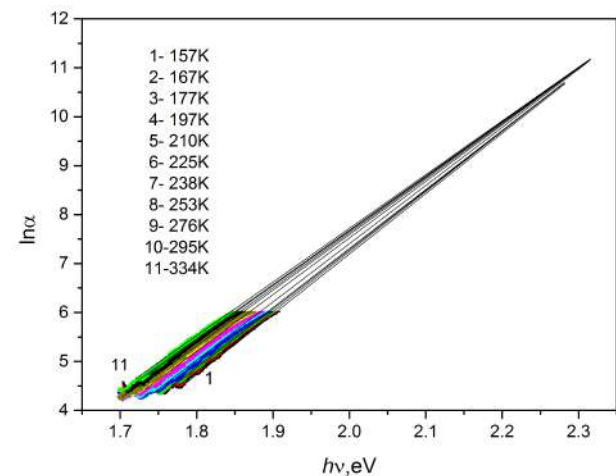


Рис. 3: Спектральні залежності коефіцієнта поглинання кристала $\text{Cu}(\text{Cr}_{0.3}\text{In}_{0.7})\text{P}_2\text{S}_6$, в напівлогарифмічному масштабі для різних температур.

Як видно із рис. 3 в досліджуваній області температур виконується правило Урбаха. Правило Урбаха можна записати у вигляді:

$$\alpha(E, T) = \alpha_0 \exp \left[\frac{\sigma(T)}{k_B T} (h\nu - E_0) \right],$$

де α_0 і E_0 параметри, що характеризують матеріал і які визначаються координатами

точки перетину екстрапольованих лінійних участків кривих $\ln \alpha(h\nu)$, $\frac{k_B T}{\sigma(T)} = W$ – величина, що характеризує нахил краю поглинання, тобто його спектральне розмиття при температурі. При цьому $\sigma(T)$ описується відомим співвідношенням:

$$\sigma(T) = \sigma_0 \left(\frac{2kT}{h\nu_p} \right) \text{th} \left(\frac{h\nu_p}{2kT} \right),$$

де σ_0 – постійна, що характеризує величину електрон (екситон)-фононої взаємодії, $h\nu_p$ – енергія ефективного фонона, який приймає участь у формуванні краю фундаментального поглинання світла.

Визначені величини α_0 , E_0 , σ_0 для кристалів $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ в параелектричній області відповідно рівні: $E_0 = 2,28$ eV, $\alpha_0 = 7,3 \times 10^5$, $\sigma_0 = 0,4$ та сегнетоелектричній – $E_0 = 2,32$ eV, $\alpha_0 = 4,2 \times 10^5$, $\sigma_0 = 0,27$.

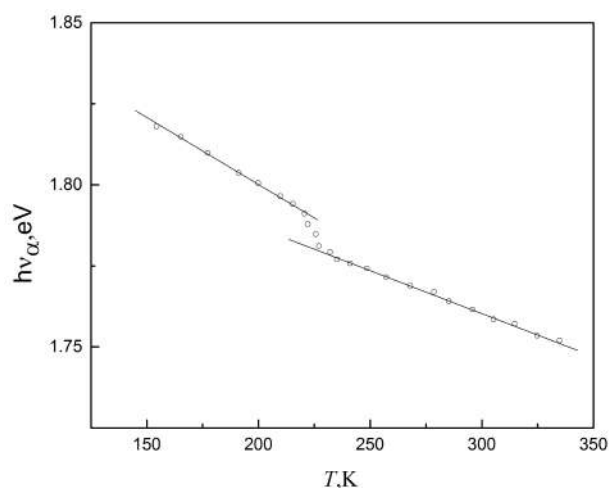


Рис. 4: Енергетичне положення краю поглинання кристалів $\text{Cu}(\text{Cr}_{0.3}\text{In}_{0.7})\text{P}_2\text{S}_6$ визначеного для рівні $\alpha=700 \text{ cm}^{-1}$.

На основі проведених досліджень краю поглинання в кристалах $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ визначена температурна поведінка енергетичного положення краю поглинання кристалів $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ приведена на рис. 4.

Стрибок, який відповідає фазовому переходу першого роду в цих кристалах, реалізується при температурі $T = 222$ К, що добре узгоджується із результатами роботи [4]. Із рис. 4 видно, що величини температурного зсуву енергетичного положення в парафазі та сегнетофазі суттєво не відрізняються і становлять відповідно $dE_g^{\text{II}}/dT = -2,7 \times 10^{-4}$ eV/K та $dE_g^c/dT = -4,3 \times 10^{-4}$ eV/K відповідно для парафазі та сегнетоелектричної фази. Ці значення майже на порядок менші аналогічних значень для кристалів CuInP_2S_6 [6].

Висновки

Досліджено спектри оптичного поглинання кристалів $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ в області фазових переходів в температурному інтервалі 150–350 К. Виявлено, що край фундаментального поглинання має експоненціальний характер і підкоряється правилу Урбаха. Визначено основні параметри правила Урбаха. Фазовий перехід 1-го роду в кристалах $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ реалізується при температурі $T_c = 222$ К.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Liu F. Room-temperature ferroelectricity in CuInP_2S_6 ultrathin flakes / F. Liu, L. You, K.L. Seyler, X. Li, P. Yu, J. Lin, X. Wang, J. Zhou, H. Wang, H. He, S.T. Pantelides, W. Zhou, P. Sharma, X. Xu // Nature Communications – 2016. – V. 7. – P. 12357–12368.
- [2] Lai Y. Two-Dimensional Ferromagnetism and Driven Ferroelectricity in van der Waals CuCrP_2S_6 / Y. Lai, Z. Song, Y. Wan, M. Xue, Ch. Wang, Y. Ye, L. Dai, Z. Zhang, W. Yang, H. Du, J. Yang // Nanoscale – 2019. – V. 12. – P. 1–15.
- [3] Maisonneuve V. Ferrielectric ordering in lamellar CuInP_2S_6 / V. Maisonneuve, V.B. Cajipe, A. Simon, R. Von Der Muhll, J. Ravez // Phys. Rev. B. – 1997. – V. 56. – P. 10860–10867.

- [4] Simon A. Paraelectric-Ferroelectric Transition in the LamellaThiophosphate CuInP_2S_6 / A. Simon, J. Ravez, V. Maisonneuve, C. Payen, V.B. Cajipe // Chem. Mater. – 1994. – V. 6. – P. 1575–1580.
- [5] Shusta A.V. Baric transformations of anomalies of dielectric permeability of $\text{CuCr}_{0,5}\text{In}_{0,5}\text{P}_2\text{S}_6$ layered crystals / A.V. Shusta, A.G. Slivka, V.S. Shusta // Uzhhorod University Scientific Herald. Series Physics. – 2017. – Iss. 41 – P. 79–84.
- [6] Guranich P.P. The optical absorption edge of $\text{Ag}_{0,05}\text{Cu}_{0,95}\text{InP}_2\text{S}_6$ layered crystals / P.P.Guranich, A.V. Shusta, A.G. Slivka, V.S. Shusta, P. Huranych // Uzhhorod University Scientific Herald. Series Physics – 2017. – Iss. 42 – P. 80–84.

Стаття надійшла до редакції 24.05.2019

О.В. Шуста, П.П. Гуранич, О.Г. Сливка, В.С. Шуста, Р. Huranych

Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54, Украина,
e-mail: pavlo.guranich@uzhnu.edu.ua

ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОВЕДЕНИЕ КРАЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$

Исследовано спектры оптического поглощения слоистых кристаллов $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ в температурном интервале 150 – 350 К. Обнаружено, что край фундаментального поглощения имеет экспоненциальный характер и подчиняется правилу Урбаха. Определены параметры правила Урбаха и температурный коэффициент сдвига энергетического положения края поглощения в исследованных кристаллах.

Ключевые слова: сегнетоэлектричество, фазовые переходы, спектры поглощения.

A.V. Shusta, P.P. Guranich, A.G. Slivka, V.S. Shusta, P. Huranych

Department of Optics, Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voshyna Str., 54, Ukraine,
e-mail: pavlo.guranich@uzhnu.edu.ua

TEMPERATURE BEHAVIOR OF ABSORPTION EDGE OF $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ LAYERED CRYSTALS

Purpose. After authors of [1, 2] have shown that CuInP_2S_6 and CuCrP_2S_6 crystals can be used as a next generation, energy independent memory storage and different vdW heterostructures - we can observe a significant growth of interest in these crystals. Besides, they are interesting objects for experimental investigations because they show different types of dipole order and you can observe ferro-, ferro-, antiferro-, incommensurate and dipole glass state on the phase diagrams of these crystals.

Methods. Studied $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ crystals were grown by the gas transport reaction method. For the measurements we have been using samples of 40-80 mkm size. Temperature of the sample has been controlled by an cuprum-constantan thermocouple with an accuracy of 0,1 K. The absorption spectrum has been investigated using an «Ocean

optics» USB 400 spectrometer with an 190 – 1000 nm wave length recording range.

Results. Spectral dependencies of the absorption coefficient of the $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ Crystals have been investigated for different temperatures. It has been determined that in the investigated temperatures range the absorption edge has exponential form. Based on the investigations of the absorption edge the temperature behavior of the energy positioning of the absorption edge of the $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ crystals has been established. The absorption edge energy jump is related to the phase transition in this crystals occurs at the temperature $T = 222$ K.

Conclusions. Optical absorption spectrums of $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ crystals in the temperature ranges of 150 - 350 K have been investigated. It has been found that the absorption edge has an exponential nature and obeys the Urbach rule. All the main parameters of the Urbach law have been determined. First order phase transition of $\text{CuCr}_{0.3}\text{In}_{0.7}\text{P}_2\text{S}_6$ crystals occurs at the temperature $T_c = 222$ K.

Keywords: ferroelectrics, phase transitions, absorption spectra.

REFERENCE

- [1] Liu, F., You, L., Seyler, K.L., Li, X., Yu, P., Lin, J., Wang, X., Zhou, J., Wang, H., He, H., Pantelides, S.T., Zhou, W., Sharma, P., Xu, X. (2016), «Room-temperature ferroelectricity in CuInP_2S_6 ultrathin flakes», *Nature Communications*, V. 7, pp. 12357–12368.
- [2] Lai, Y., Song, Z., Wan, Y., Xue, M., Wang, Ch., Ye, Y., Dai, L., Zhang, Z., Yang, W., Du, H., Yang, J. (2019), «Two-Dimensional Ferromagnetism and Driven Ferroelectricity in van der Waals CuCrP_2S_6 », *Nanoscale*, V. 12, pp. 1–15.
- [3] Maisonneuve, V., Cajipe, V. B., Simon, A., Von Der Muhll, R., Ravez, J. (1997), «Ferroelectric ordering in lamellar CuInP_2S_6 », *Phys. Rev. B*, V. 56, pp. 10860–10867.
- [4] Simon, A., Ravez, J., Maisonneuve, V., Payen, C., Cajipe, V.B. . (1994), «Paraelectric-Ferroelectric Transition in the Lamella Thiophosphate CuInP_2S_6 », *Chem. Mater*, V. 6, pp. 1575–1580.
- [5] Shusta, A.V., Slivka, A.G., Shusta, V.S. (2017), «Baric transformations of anomalies of dielectric permeability of $\text{CuCr}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}_2\text{S}_6$ layered crystals» [«Barychna transformatsiya anomalii dielektrychnoyi pronyknosti sharuvatykh krystaliv $\text{CuCr}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}_2\text{S}_6$ »], *Uzhhorod University Scientific Herald. Series Physics* [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fiz.], Iss. 41, pp. 79–84.
- [6] Guranich, P.P., Shusta A.V., Slivka A.G., Shusta, V.S., Huranych, P. (2017), «The optical absorption edge of $\text{Ag}_{0.05}\text{Cu}_{0.95}\text{InP}_2\text{S}_6$ layered crystals» [«Kray fundamental'noho pohlynannya sharuvatykh krystaliv $\text{Ag}_{0.05}\text{Cu}_{0.95}\text{InP}_2\text{S}_6$ »], *Uzhhorod University Scientific Herald. Series Physics* [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fiz.], Iss. 42, pp. 80–84.

©Ужгородський національний університет

УДК 538.951, 531.7
PACS 61.43.Fs, 62.25.+g, 68.60.Bs, 81.07.-b
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.19-26

А.І. Погодін, О.П. Кохан, О.О. Ямковий, Л.М. Сусліков, І.П.Студеняк

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54, Україна,
 e-mail: studenyak@dr.com

ЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ СУПЕРІОННИХ ПРОВІДНИКІВ $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$

Виготовлено полімерні композити на основі твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$. Проведено вимірювання електричної провідності композитів методом імпедансної спектроскопії в частотному діапазоні від 20 Гц до 2×10^6 Гц та температурному інтервалі 292–338 К. Отримано частотні залежності загальної електричної провідності, побудовано діаграми Найквіста та проведено їх аналіз. На основі концентраційних залежностей вивчено вплив катіонного заміщення $\text{Cu}^+ \rightarrow \text{Ag}^+$ на загальну електропровідність та енергію активації, на електронну та іонну компоненти електропровідності композитів на основі $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$.

Ключові слова: тверді розчини, композити, електрична провідність, енергія активації, концентраційна залежність.

Вступ

Кристали $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ належать до сполук зі структурою аргіродита [1, 2]. Вони характеризуються високими значеннями електричної провідності та малими значеннями енергії активації [3, 4]. Це викликає практичний інтерес до згаданих матеріалів, пов'язаний з можливістю їх використання для потреб твердотілової іоніки, наприклад, у ролі акумуляторів, суперконденсаторів та електрохімічних сенсорів [5–8].

Результати дослідження оптичних властивостей твердих розчинів на основі $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ наведено в роботах [9, 10]. В роботі [10] показано, що в кристалах твердих розчинів $\text{Cu}_7(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)\text{S}_5\text{I}$ спостерігається урбахівська поведінка краю поглинання. При катіонному заміщенні $\text{Ge}^{+4} \rightarrow \text{Si}^{+4}$ виявлено нелінійне збільшення ширини оптичної псевдощілини та характерну для твердих розчинів зміну урбахівської енергії.

Метою даної роботи було приготування композитів, дослідження частотних та температурних залежностей електричної провідності, а також вивчення концентраційної поведінки загальної провідності, іонної та електронної компонент провідності та енергії активації композитів на основі твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$.

ційної поведінки загальної провідності, іонної та електронної компонент провідності та енергії активації композитів на основі твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$.

Методика експерименту

Для виготовлення композитів були синтезовані сполуки на основі $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) за методикою, описаною в роботі [11]. Потім порошки (10–50 мкм) перемішувалися з етилен-вінілацетатним полімером, розчиненим у етилацетаті у співвідношенні: 90 мас.% $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$ – 10 мас.% ЕВА (етилен-вінілацетат). Перемішування проводилося на протязі 10–15 хв (з використанням ультразвуку) для одержання гомогенних суспензій, які в подальшому висувували при температурі 333 К. Пресування зразків проводили при тиску 400 МПа, в результаті чого були одержані зразки композитів у вигляді дисків діаметром 8 мм, товщиною 2.5–4 мм.

Дослідження електропровідності ком-

позитів на основі сполук $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) проводилися методом імпедансної спектроскопії [12], в частотному ($20 \text{ Гц} - 2 \times 10^6 \text{ Гц}$) та температурному ($292-338\text{K}$) діапазонах з використанням високоточного LCR метра Keysight E4980A. Амплітуда змінного струму складала 10 мВ . Вимірювання проводилося двохелектродним методом на блокуючих (електронних) золотих контактах. Золоті контакти наносилися методом хімічного осадження з розчинів. У ролі вихідних розчинів використовували 0.02M тетрахлоаурат (III) натрія $\text{Na}[\text{AuCl}_4]$ та розчин формаліну ($40\%\text{CH}_2\text{O} + 8\%\text{CH}_3\text{OH} + 52\%\text{H}_2\text{O}$) (відновник) у співвідношенні $5:1$. Осадження проводилося при температурі не більше 293 K . Встановлено, що підвищення температури негативно впливає на якість осадової плівки за рахунок зростання швидкості відновлення.

Результати та їх обговорення

Для всіх композитів на частотних залежностях загальної електричної провідності спостерігається зростання провідності з підвищенням частоти (рис. 1), що характерно для матеріалів з іонною провідністю у твердому стані [13].

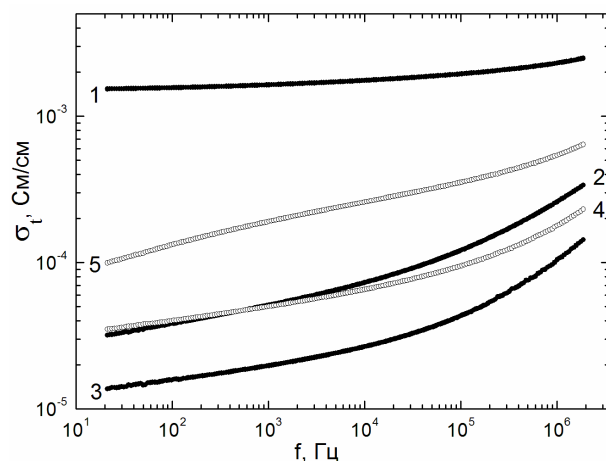


Рис. 1: Частотні залежності загальної електричної провідності при 293 K для композитів на основі твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$: $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ (1), $(\text{Cu}_{0.75}\text{Ag}_{0.25})_7\text{SiS}_5\text{I}$ (2), $(\text{Cu}_{0.5}\text{Ag}_{0.5})_7\text{SiS}_5\text{I}$ (3), $(\text{Cu}_{0.25}\text{Ag}_{0.75})_7\text{SiS}_5\text{I}$ (4), $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ (5).

На рис. 2 наведено концентраційну залежність загальної електропровідності при частоті 100 кГц . Встановлено, що залежність загальної провідності від хімічного складу композитів на основі твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$ має нелінійний характер (рис. 2). Провідність композиту на основі $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ при 293 K складає $1.7 \times 10^{-3} \text{ См/см}$, тоді як $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ характеризується дещо нижчим значенням провідності $4.1 \times 10^{-4} \text{ См/см}$. Композити на основі твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$ ($x = 0.25, 0.5, 0.75$) мають нижчі значення електричної провідності, ніж композити на основі $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$, що очевидно пов'язано з їх значним композиційним розупорядкуванням.

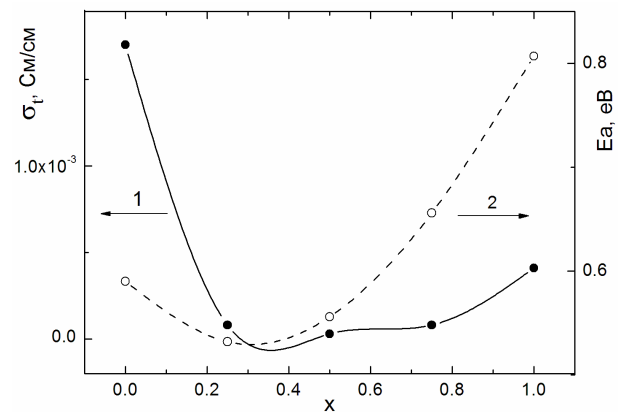


Рис. 2: Концентраційні залежності загальної електричної провідності (1) при 293 K та 100 кГц та енергії активації (2) для композитів на основі твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$.

Для більш детального аналізу температурної поведінки композитів було побудовано температурні залежності електропровідності. Виявлено, що залежності електричної провідності від $1/T$ носять лінійний характер та описуються законом Арреніуса, що дало змогу визначити енергії активації загальної провідності (рис. 3). Як видно з рис. 3, для композитів на основі твердих розчинів $(\text{Cu}_{0.75}\text{Ag}_{0.25})_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $(\text{Cu}_{0.5}\text{Ag}_{0.5})_7\text{SiS}_5\text{I}$ значення енергії активації загальної провідності є меншими у порівнянні зі значеннями для $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ ($E_a = 0.590 \text{ eV}$) та $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ ($E_a = 0.807 \text{ eV}$).

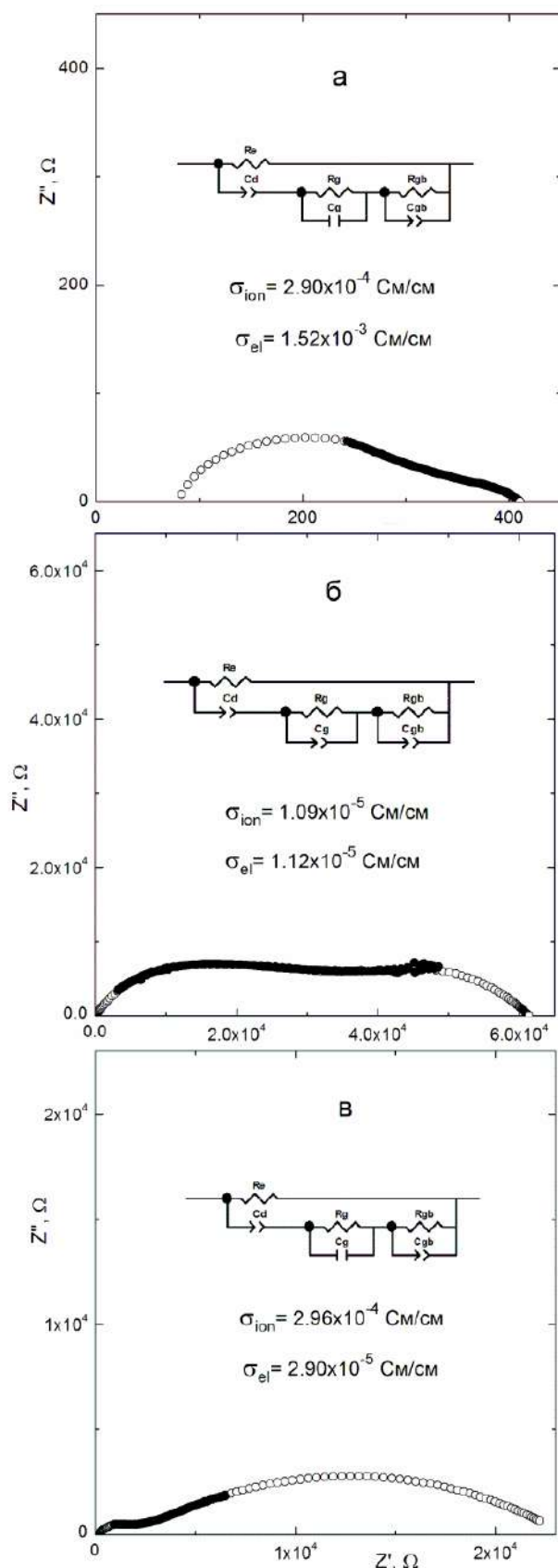


Рис. 3: Діаграми Найквіста для композитів на основі $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ (а), $(\text{Cu}_{0.5}\text{Ag}_{0.5})_7\text{SiS}_5\text{I}$ (б) та $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ (в): експериментальні дані (заповнені кільця), розрахункові дані (незаповнені кільця) та ЕЕС.

Для детальних досліджень частотної поведінки електропровідності, встановлення відповідності електро-хімічних процесів і розділення на іонну та електронну компоненти провідності використано стандартний підхід з використанням електродних еквівалентних схем (ЕЕС) [12] та їх аналіз на діаграмах Найквіста. Під час аналізу всіх зразків врахована паразитна індуктивність комірки ($4 \times 10^{-7} \text{ Г}$).

При аналізі композитів на основі $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та твердих розчинів на їх основі $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$ вибрана ЕЕС (рис. 3), яка характеризується наявністю електронного опору R_e , паралельно якому включена ємність подвійного дифузійного шару C_d , та елементів, які відповідають за іонні процеси: опір R_{gb} та ємність C_{gb} границь зерен, опір зерен R_g з паралельно включеною їх ємністю C_g . На діаграмах Найквіста для досліджуваних композитів (рис. 3) спостерігаються два півкола: низькочастотному півколу відповідають ємність подвійного дифузійного шару C_d , опір R_{gb} та ємність C_{gb} границь зерен, тоді як високочастотному півколу – опір R_g та ємність C_g зерен. Паралельно до елементів, які відповідають іонним процесам, у ЕЕС включений опір R_e , який відповідає за електронну складову провідності і вносить свій вклад як у низькочастотне, так і у високочастотне півкола.

Проведений аналіз частотних залежностей дав змогу дослідити концентраційну поведінку іонної та електронної компонент провідності композитів на основі твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) (рис. 4а). Зазначимо, що провідність складається з суми провідностей в зернах та на границях між зернами відповідно.

Встановлено, що залежність іонної провідності від складу, є нелінійною з мінімумом на концентраційній залежності (рис. 4а). Іонна провідність $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ при 293 К складає $2.90 \times 10^{-4} \text{ CM/CM}$, тоді як $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ характеризується трохи вищим значенням іонної провідності $2.96 \times 10^{-4} \text{ CM/CM}$, що пов'язано з більшою розупорядкованістю рухливих позицій Ag порівняно з позиціями Cu у кристалічній ґратці.

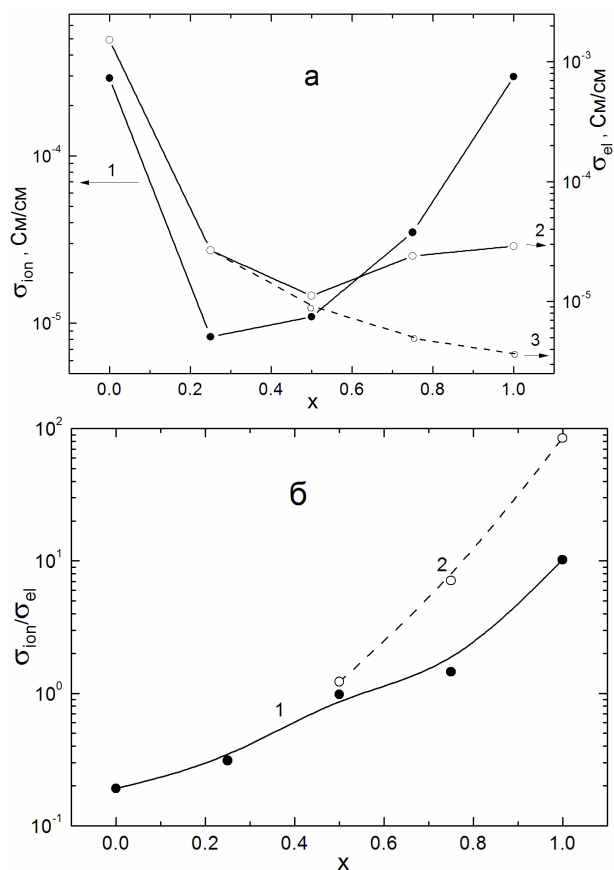


Рис. 4: Концентраційні залежності іонної (1) та електронної компонент (2) електричної провідності (а) та відношення іонної провідності до електронної (б) для композитів на основі твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{Si}_5\text{I}$.

При цьому значення електронної провідності, яке для композиту на основі $\text{Cu}_7\text{Si}_5\text{I}$ складає $1.5 \times 10^{-3} \text{ Cm/cm}$, в процесі катіонного заміщення $\text{Cu}^+ \rightarrow \text{Ag}^+$ зменшується і для композиту на основі $\text{Ag}_7\text{Si}_5\text{I}$ складає $2.9 \times 10^{-5} \text{ Cm/cm}$ (рис. 4а). Оскільки композит на основі $\text{Ag}_7\text{Si}_5\text{I}$ характеризується найнижчим значенням електронної провідності у дослідженій системі, тому можна припустити, що на низькочастотній ділянці ($< 20 \text{ Гц}$), може спостерігатися ще одне півколо, яке відповідає за дифузійні іонні процеси в межах подвійного дифузійного шару з паралельно включеною електронною провідністю. За результатами розрахунків отримано, що електронна провідність для композиту на основі $\text{Ag}_7\text{Si}_5\text{I}$ у такому випадку становить $< 3.6 \times 10^{-6} \text{ Cm/cm}$ (крива 3 на рис. 4а).

Так, як однією з основних характеристик суперіонних матеріалів є співвідношення іонної до електронної провідності, на

рис. 4б наведено її концентраційну залежність. Встановлено, що при переході від композиту на основі $\text{Cu}_7\text{Si}_5\text{I}$, для якого електронна компонента провідності у 5 разів перевищує іонну, до композиту на основі $\text{Ag}_7\text{Si}_5\text{I}$ співвідношення $\sigma_{\text{ion}}/\sigma_{\text{el}}$ має тенденцію до зростання і для композиту на основі $\text{Ag}_7\text{Si}_5\text{I}$ іонна провідність у 10 разів перевищує електронну (крива 1 на рис. 4б), а з врахуванням можливої наявності низькочастотного півкола іонна провідність для композиту на основі $\text{Ag}_7\text{Si}_5\text{I}$ може більше ніж у 100 разів перевищувати електронну (крива 2 на рис. 4б).

Висновки

Для приготування композитів були синтезовані сполуки на основі $\text{Cu}_7\text{Si}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{Si}_5\text{I}$ та твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{Si}_5\text{I}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$). Композити були виготовлені шляхом перемішування порошків твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{Si}_5\text{I}$ з етиленвінілацетатом у пропорції 9:1, суміш яких в подальшому висушували та пресували. Дослідження електропровідності композитів на основі твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{Si}_5\text{I}$ проводилися методом імпедансної спектроскопії в частотному діапазоні від 20 Гц до $2 \times 10^6 \text{ Гц}$ та температурному інтервалі $292 - 338 \text{ К}$. Вимірювання проводилося двоелектродним методом на блокуючих золотих контактах.

Для всіх композитів на частотних залежностях загальної електричної провідності виявлено зростання провідності з підвищенням частоти. Встановлено, що зі збільшенням вмісту Ag в композитах на основі твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{Si}_5\text{I}$ загальна електрична провідність нелінійно зменшується з прогином «вниз», тоді як енергія активації нелінійно збільшується з прогином «вниз».

Побудовано діаграми Найквіста та проведено їх детальний аналіз за допомогою електродно еквівалентної схеми, який дозволив розділити вклади іонної та електронної компонент в загальну електропровідність. Встановлено, що залежність іонної провідності від складу, є нелінійною з мінімумом на концентраційній залежності, причому во-

на є майже однаковою для $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ (2.90×10^{-4} См/см) та $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ (2.96×10^{-4} См/см). Електронна провідність зі збільшенням вмісту срібла нелінійно зменшується з прогином «вниз», а її значення для $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ майже на два порядки менше ніж для $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$. Аналіз

концентраційної залежності відношення іонної провідності до електронної показав, що внаслідок катіонного заміщення $\text{Cu}^+ \rightarrow \text{Ag}^+$ воно нелінійно зростає більш ніж на порядок.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Kuhs W.F. The argyrodites – a new family of the tetrahedrally close-packed structures / W.F. Kuhs, R. Nitsche, K. Scheunemann // Mater. Res. Bull. – 1979. – Vol. 14. – P. 241–248.
- [2] Nilges T. A structural differentiation of quaternary copper argyrodites: Structure – property relations of high temperature ion conductors / T. Nilges, A. Pfitzner // Z. Kristallogr. – 2005. – Vol. 220. – P. 281–294.
- [3] Laqibi M. New silver superionic conductors $\text{Ag}_7\text{XY}_5\text{Z}$ (X= Si, Ge, Sn; Y= S, Se; Z = Cl, Br, I) – synthesis and electrical properties / M. Laqibi, B. Cros, S. Peytavin, M. Ribes // Solid State Ionics. – 1987. – Vol. 23. – P. 21–26.
- [4] Dziaugys A. Conductivity investigations of $\text{Cu}_7\text{GeS}_5\text{I}$ family fast-ion conductors / A. Dziaugys, J. Banys, A. Kezionis, V. Samulionis, I. Studenyak // Solid State Ionics. – 2008. – Vol. 179. – P. 168–171.
- [5] Студеняк І.П. Процеси розупорядкування в суперіонних провідниках зі структурою аргіродита. / І.П. Студеняк, М. Краньчєц. – Ужгород: В-тво. Говерла, 2007. – 208 с.
- [6] Orliukas A.F. Preparation, electric conductivity and dielectrical properties of $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{I}$ -based superionic composites / A.F. Orliukas, E. Kazakevicius, A. Kezionis, T. Salkus, I.P. Studenyak, R. Yu. Buchuk, I.P. Prits, V.V. Panko // Solid State Ionics. – 2009. – Vol. 180. – P. 183–186.
- [7] Studenyak I.P. Temperature variation of electrical conductivity and absorption edge in $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ advanced superionic conductor / I.P. Studenyak, M. Kranjčec, V.V. Bilanchuk, O.P. Kokhan, A.F. Orliukas, E. Kazakevicius, A. Kezionis, T. Salkus // J. Phys. Chem. Solids. – 2009. – Vol. 70. – P. 1478–1481.
- [8] Šalkus T. Influence of grain size effect on electrical properties of $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{I}$ superionic ceramics / T. Šalkus, E. Kazakevičius, J. Banys, M. Kranjčec, A.A. Chomolyak, Yu.Yu. Neimet, I.P. Studenyak // Solid State Ionics. – 2014. – Vol. 262. – P. 597–600.
- [9] Studenyak I.P. Crystal growth and phase interaction studies in $\text{Cu}_7\text{GeS}_5\text{I}$ – $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ superionic system / I.P. Studenyak, O.P. Kokhan, M. Kranjčec, M.I. Hrechyn, V.V. Panko // J. Cryst. Growth. – 2007. – Vol. 306. – P. 326–329.
- [10] Бендак А.В. Особливості композиційного розупорядкування в кристалах твердих розчинів $\text{Cu}_7(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)\text{S}_5\text{I}$ / А.В. Бендак, О.О. Ямковий, В.В. Біланчук, І.П. Студеняк // Науковий вісник Ужгородського університету. Сер. Фізика. – 2014. – № 36. – С. 37–40.
- [11] Погодін А.І. 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 / А.І. Погодін, М.Й. Філеп, М.М. Лучинець, О.О. Ямковий, О.П. Кохан, І.П. Студеняк // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Сер. «Фізика». – 2018. – Вип. 43. – С. 9–14.

- [12] Orazem M.E. Electrochemical Impedance Spectroscopy / M.E. Orazem, B. Tribollet. – New Jersey: John Wiley & Sons, 2008. – 525 p.
- [13] Иванов-Шиц А.К. Ионика твердого тела / А.К. Иванов-Шиц, И.В. Мурин.– С. Петербург: Изд-во Петербургского у-та, т.1, 2000. – 616 с.

Стаття надійшла до редакції 25.06.2019

А.И. Погодин, А.П. Кохан, А.А. Ямковий, Л.М. Сусликов, И.П.Студеняк

Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54, Украина,
e-mail: studenyak@dr.com

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ СУПЕРИОННЫХ ПРОВОДНИКОВ (Cu_{1-x}Ag_x)₇SiS₅I

Изготовлены полимерные композиты на основе твердых растворов (Cu_{1-x}Ag_x)₇SiS₅I. Проведены исследования электрической проводимости композитов методом импедансной спектроскопии в частотном диапазоне от 20 Гц до 2×10^6 Гц и температурном интервале 292–338 К. Получены частотные зависимости общей электрической проводимости, построены диаграммы Найквиста и проведен их анализ. На основе концентрационных зависимостей изучено влияние катионного замещения Cu⁺ → Ag⁺ на общую электропроводность и энергию активации, на электронную и ионную компоненты электропроводности композитов на основе (Cu_{1-x}Ag_x)₇SiS₅I.

Ключевые слова: твердые растворы, композиты, электрическая проводимость, энергия активации, концентрационная зависимость.

A.I. Pogodin, O.P. Kokhan, O.O. Yamkoviy, L.M. Suslikov, I.P. Studenyak

Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, 54, Voloshyna Str., Ukraine, e-mail: studenyak@dr.com

ELECTRICAL PROPERTIES OF COMPOSITES BASED ON SOLID SOLUTIONS OF (Cu_{1-x}Ag_x)₇SiS₅I SUPERIONIC CONDUCTORS

Purpose. The purpose of this research was to prepare composites, to study frequency and temperature dependences of electrical conductivity, as well as to investigate the concentration behavior of the total conductivity, the ionic and electron conductivity component, and the activation energy of composites based on (Cu_{1-x}Ag_x)₇SiS₅I solid solutions.

Methods. Compounds based on Cu₇SiS₅I, Ag₇SiS₅I and (Cu_{1-x}Ag_x)₇SiS₅I ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) solid solutions were synthesized for preparing the composites. Then, the powders (10 – 50 μm) were mixed with ethylene-vinyl acetate polymer dissolved in ethyl acetate in the ratio: 90 wt.% of (Cu_{1-x}Ag_x)₇SiS₅I – 10 wt.% of EVA (ethylene-vinyl acetate). The stirring was carried out for 10-15 minutes to obtain homogeneous suspensions which were subsequently

dried at a temperature of 333 K. The samples were pressed at a pressure of 400 MPa, resulting in samples of composites in the form of discs 8 mm in diameter and thickness of 2.5 – 4 mm. Investigation of the electrical conductivity of composites based on $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ compounds and solid solutions of $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) was carried out by the method of impedance spectroscopy, in frequency (20 Hz – 2×10^6 Hz) and temperature (292 – 338K) ranges using the high-precision LCR meter Keysight E4980A. Measurement was carried out by a two-electrode method on blocking gold contacts, which were applied by chemical precipitation from solutions.

Results. The frequency dependences of the total electrical conductivity showed a growth of conductivity with increasing frequency for all composites. It has been established that with increasing Ag content in composites based on solid solutions of $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$, the total electrical conductivity decreases non-linearly with the downward-bowing, while the activation energy increases non-linearly with the downward-bowing. Nyquist diagrams were constructed and their detailed analysis was carried out using an electrodes-equivalent circuit. While performing the analysis of composites based on $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ and solid solutions based on them $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$, the electrodes-equivalent circuit was chosen, which is characterized by the presence of the electronic resistance R_e , parallelly to which the capacity of the double diffusion layer C_d is included. It is also characterised by the elements responsible for the ionic processes: the resistance R_{gb} and the capacity of the grain boundaries C_{gb} , the resistance of the grains R_g with the parallel inclusion of their capacity C_g . Using the Nyquist diagrams and the electrodes-equivalent circuit, the contributions of the ionic and electron components to the total electrical conductivity were separated. It is established that the dependence of the ionic conductivity on the composition is nonlinear with a minimum on the concentration dependence, and it is almost identical for $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ (2.90×10^{-4} S/cm) and $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ (2.96×10^{-4} S/cm). Electronic conductivity with an increase in the content of silver is not necessarily decreasing with the downward-bowing, and its value for $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ is almost two orders smaller than for $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$. The analysis of the compositional dependence of the ratio of the ionic conductivity to the electronic one showed that, due to cation substitution of $\text{Cu}^+ \rightarrow \text{Ag}^+$, it nonlinearly increases by more than an order of magnitude.

Conclusions. Polymer composites based on solid solutions $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$ were prepared. Measurements of electrical conductivity of composites by means of impedance spectroscopy in the frequency range from 20 Hz to 2×10^6 Hz and in the temperature range 292 – 338 K were carried out. Frequency dependences of total electrical conductivity were obtained, Nyquist diagrams were constructed and the dependences analysis were performed. The influence of the cation substitution of $\text{Cu}^+ \rightarrow \text{Ag}^+$ on the total electrical conductivity and activation energy, on the electronic and ionic components of the conductivity of composites based on $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{SiS}_5\text{I}$ was studied on the basis of compositional dependences.

Keywords: solid solutions, composites, electrical conductivity, activation, compositional dependence.

REFERENCES

- [1] Kuhs, W.F., Nitsche, R., Scheunemann, K. (1979), «The argyrodites – a new family of the tetrahedrally close-packed structures», *Mater. Res. Bull.*, V. 14, pp. 241–248.
- [2] Nilges, T., Pfitzner, A. (2005), «A structural differentiation of quaternary copper argyrodites: Structure – property relations of high temperature ion conductors», *Z. Kristallogr.*, V. 220, pp. 281–294.
- [3] Laqibi, M., Cros, B., Peytavin, S., Ribes, M. (1987), «New silver superionic conductors $\text{Ag}_7\text{XY}_5\text{Z}$ ($X = \text{Si, Ge, Sn}$; $Y = \text{S, Se}$; $Z = \text{Cl, Br, I}$) – synthesis and electrical properties», *Solid State Ionics.*, V. 23, pp. 21–26.
- [4] Dziaugys, A., Banyš, J., Kezionis, A., Samulionis, V., Studenyak, I. (2008), «Conductivity investigations of $\text{Cu}_7\text{GeS}_5\text{I}$ family fast-ion conductors», *Solid State Ionics.*, V. 179, pp. 168–171.
- [5] Studenyak, I.P., Kranjčec, M. (2007), «Disordering processes in superionic conductors with argyrodite structure» [«Protsesy rozuporiadkuvannia v superionnykh providnykakh zi strukturoiu arhirodyta»], Hoverla, Uzhgorod, 208 p.
- [6] Orliukas, A.F., Kazakevicius, E., Kezionis, A., Salkus, T., Studenyak, I.P., Buchuk, R.Yu., Prits, I.P., Panko, V.V. (2009), «Preparation, electric conductivity and dielectrical properties of $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{I}$ -based superionic composites», *Solid State Ionics.*, V. 180, pp. 183–186.

- [7] Studenyak, I.P., Kranjčec, M., Bilanchuk, V. V., Kokhan, O.P., Orliukas, A.F., Kazakevicius, E., Kezionis, A., Salkus, T. (2009), «Temperature variation of electrical conductivity and absorption edge in $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ advanced superionic conductor», J. Phys. Chem. Solids., V. 70, pp. 1478–1481.
- [8] Šalkus, T., Kazakevičius, E., Banys, J., Kranjčec, M., Chomolyak, A.A., Neimet, Yu.Yu., Studenyak, I.P. (2014), «Influence of grain size effect on electrical properties of $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{I}$ superionic ceramics», Solid State Ionics., V. 262, pp. 597–600.
- [9] Studenyak, I.P., Kokhan, O.P., Kranjčec, M., Hrechyn, M.I., Panko, V.V. (2007), «Crystal growth and phase interaction studies in $\text{Cu}_7\text{GeS}_5\text{I}$ – $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$ superionic system», J. Cryst. Growth., V. 306, pp. 326–329.
- [10] Bendak, A.V., Yamkovy, O.O., Bilanchuk, V.V., Studenyak, I.P. (2014), «Peculiarities of compositional disordering in $\text{Cu}_7(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)\text{S}_5\text{I}$ solid solution crystals»[«Ocoblyvosti kompozytsiinoho rozuporiadkuvannia v krystalakh tverdykh rozchyniv $\text{Cu}_7(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)\text{S}_5\text{I}$ »], Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Physics [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fiz.], N 36, pp. 37–40.
- [11] Pogodin, A.I., Filep, M.Y., Luchynets, M.M., Yamkovy, O.O., Kokhan, O.P., Studenyak, I.P. (2018), «Synthesis, growth and structural investigation of $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ single crystals and solid solutions on their base»[«Syntez, vyroshchuvannia ta strukturni doslidzhennia monokrystaliv $\text{Cu}_7\text{SiS}_5\text{I}$, $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ ta tverdykh rozchyniv na yikh osnovi»], Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Physics [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fiz.], N 43, pp. 9–14.
- [12] Orazem, M.E., Tribollet, B. (2008), «Electrochemical Impedance Spectroscopy», New Jersey, John Wiley & Sons, 525 p.
- [13] Ivanov-Schitz, A.K., Murin, I.V. (2000), «Solid State Ionics»[«Ionika tverdogo tela»], S.-Petersburg, Univ. Press, V. 1, 616 p.

©Ужгородський національний університет

УДК 535.3, 536.669; 537.363, 539.213, 541.67, 621.315.59
PACS 61.43.Fs, 73.61.Jc, 77.84.Bw, 78.30.Ly, 79.60.-i, 61.46.Bc
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.27-38

В.М. Рубіш¹, С.М. Гасинець¹, О.М. Грещук², Л.І. Макар¹, О.А. Михайло¹,
 Р.П. Пісак¹, І.М. Різак¹, А.М. Соломон³, В.О. Юхимчук², Т.І. Ясірко¹

¹Ужгородська лабораторія матеріалів оптоелектроніки та фотоніки Інституту проблем реєстрації інформації НАН України, 88000, Ужгород, вул. Замкові сходи, 4, Україна,
 e-mail: center.uzh@gmail.com

²Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України, 03028, Київ, пр. Науки, 45, Україна

³Інститут електронної фізики НАН України, 88017, Ужгород, вул. Університетська, 21, Україна

СТРУКТУРА СТЕКОЛ І КОМПОЗИТІВ В СИСТЕМІ $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$

Приведені результати мікроскопічних, X-променевих та термографічних досліджень свіжоприготованих та відпалених стекол в системі $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$. Встановлена наногетерогенна будова стекол. Кристалізація стекол відбувається у декілька етапів. Структура фази, яка формується в скляній матриці під час кристалізації, відповідає структурі кристалічного сульфойодиду стибію. Розміри кристалічних включень SbSI залежать від термочасових режимів обробки стекол.

Ключові слова: халькогалогенідні стекла, раманівські спектри, структура, кристалізація, сегнетоелектрики.

Вступ

Широкі можливості практичного застосування (сегнетоситали, нелінійні діелектрики, сенсори різноманітного призначення, елементи пам'яті, ІЧ та нелінійної оптики) стимулюють одержання та дослідження композитних матеріалів, наділених сегнетоелектричними властивостями. В цьому плані значний інтерес представляють стекла і аморфні плівки в системі As-Sb-S-I . В даній системі (по розрізу $\text{Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$) утворюється стехіометричний сульфойодид стибію (SbSI), який в кристалічному стані є найбільш яскравим представником широкого класу сегнетоелектриків-напівпровідників $\text{A}^{\text{V}}\text{B}^{\text{VI}}\text{C}^{\text{VII}}$ [1].

У склоподібному виді SbSI та сплави $(\text{Sb}_2\text{S}_3)_{100-x}(\text{SbI})_x$, за складом близькі до нього, можна одержати жорстким гартуванням розплавів при швидкостях охолодження $\sim 150\text{--}300\text{ K/c}$ і в дуже малих кількостях [2, 3]. Дослідження стекол даної системи методами дифракції рентгенівських

променів, ІЧ та раманівської спектроскопії показали [2, 4–6], що вони мають наногетерогенну будову. Їх матриця побудована тільки бінарними структурними одиницями $\text{SbS}_{3/2}$ та SbI_3 і містить незначну кількість молекулярних фрагментів з гомоплярними зв'язками сірка-сірка. При нагріванні стекол в інтервалі температур «температура розм'якшення-температура кристалізації» відбувається структурна перебудова (розрив і перемикання хімічних зв'язків Sb-S , Sb-I , S-S), яка закінчується формуванням в скляній матриці потрібних ланцюжкових угруповань $\text{SbS}_{2/2}\text{I}$, характерних для кристалів SbSI [1, 7]. Така структурна перебудова супроводжується аномаліями на температурних залежностях діелектричних параметрів (ϵ і $\text{tg}\delta$) досліджуваних матеріалів [2]. Кристалізація стекол супроводжується різким зростанням діелектричної проникності. На залежностях $\epsilon(T)$ і $\text{tg}\delta(T)$ закристалізованих стекол виявлені особливості, що свідчать про наявність розмитого сегнетоелектричного фазового переходу. При цьому

характер особливостей в значній мірі визначається умовами термічної обробки зразків. Це означає, що на основі стекел системи Sb-S-I можна одержувати сегнетоактивні композиції з прогнозованими і керованими параметрами.

Однак, практичне застосування склоподібного SbSI і стекел системи $\text{Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ є обмеженим через технологічні труднощі їх одержання. Одержання ж у склоподібному виді халькогенідів та халькогалогенідів арсену (наприклад, As_2S_3 , As_2Se_3 , AsSI , AsSeI) не викликає особливих труднощів [8, 9]. Тому введення арсену (у вигляді As_2S_3 і AsSI) у склад сплавів системи Sb-S-I дозволило суттєво підвищити склоутворювальну здатність змішаних сплавів $(\text{As}_2\text{S}_3)_{100-x}(\text{SbSI})_x$ і $(\text{Sb}_2\text{S}_3)_{100-x}(\text{AsSI})_x$ та розширити коло матеріалів, в яких можливо реалізувати сегнетоелектричну фазу в скляній матриці.

В [10–22] було показано, що в стеклах і плівках систем $\text{As}_2\text{S}_3\text{-SbSI}$ і $\text{Sb}_2\text{S}_3\text{-AsSI}$ за певних умов термічної обробки (неперервне нагрівання або ізотермічний відпал) та лазерного опромінення формуються нано- та мікрокристалічні включення сульфойодиду стибію. При цьому відмітимо, що структурних угруповань $\text{SbS}_{2/2}\text{I}$, які могли б виступати в ролі кристалічних зародків, в матриці цих стекел не було виявлено. Процес формування включень SbSI різної розмірності супроводжується суттєвими змінами діелектричних та оптичних параметрів. В [23] показана можливість формування нанорозмірних кристалічних включень SbSI в матриці стекел системи $\text{As}_2\text{S}_3\text{-SbSI}$ у процесі їх синтезу.

З наведених даних видно, що попередні дослідження по формуванню композицій, наділених сегнетоелектричними властивостями, проводились для стекел, одним із компонентів яких є потрійна сполука (SbSI або AsSI). Як правило, SbSI і AsSI одержують методом вакуумного плавлення відповідних сумішей Sb_2S_3 і SbI_3 та As_2S_3 і AsI_3 , відповідно [8]. А це додатковий етап у технологічному процесі одержання стекел. У зв'язку з цим, цікавою видалась ідея оминати етап одержання потрійної сполуки і синтезувати стекла системи As-Sb-S-I по розрі-

зам $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ та $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-AsI}_3$.

В даній роботі наведені результати термографічних, X-променевих і мікроскопічних досліджень умов формування та природи кристалічних включень в матриці стекел системи $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ при їх термічній обробці.

Методика експерименту

Стекла системи $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ (склади I–IV) були синтезовані методом вакуумного плавлення відповідних сумішей попередньо синтезованих бінарних сполук (табл.1). Маса наважок складала 10 г. При синтезі стекел використовувалось ступінчасте підвищення температури. Розплави періодично перемішувались. As_2S_3 отримано у вигляді скла охолодженням гомогенізованого протягом 48 год. розплаву від 780 К на повітрі. Sb_2S_3 і SbI_3 отримані у вигляді полікристалічних зливків охолодженням гомогенізованих розплавів у режимі виключеної печі. Температури і час гомогенізації розплавів Sb_2S_3 і SbI_3 складали 900 і 445 К та 72 і 12 год., відповідно. Стекла системи $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ отримані охолодженням гомогенізованих протягом 24–36 год. розплавів від 820–850 К у холодній (273 К) воді.

Відпал стекел проводили у вакуумі при температурах 348 К (12, 24, 48 год.) та 398 К (1, 2, 5 год.). Температури відпалу вибирались з урахуванням результатів досліджень неізотермічної кристалізації стекел. Неізотермічна кристалізація стекел $x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$ досліджувалась методом кількісного диференціально-термічного аналізу (ДТА) в інтервалі температур 293–700 К. Лінійне нагрівання зразків здійснювалося за допомогою програмних регуляторів температури РИФ-101. Точність вимірювання температури – ± 0.5 К. Криві ДТА знімалися при швидкості нагрівання 3 К/хв. З кривих ДТА визначались температури максимумів екзотермічних ефектів.

Дослідження мікроскопічних спектрів і дифрактограм свіжоприготованих і відпалених стекел кристалічних матеріалів проводились при кімнатній температурі на спектрометрі Horiba Jobin-Yvon

($\lambda_{\text{зб.}} = 457 \text{ нм}$) і рентгенівському апараті ДРОН-3 з використанням $\text{CuK}\alpha$ - випромінювання ($\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$), відпо- відно.

Табл. 1: Склади стекел системи As_2S_3 - Sb_2S_3 - SbI_3 та температури максимумів їх екзотермічних ефектів.

Склад	Молярний вміст компонентів, мол. %			Атомний вміст елементів, ат. %				Температури максимумів екзотермічних ефектів, К		
	As_2S_3	Sb_2S_3	SbI_3	As	Sb	S	I	T_{cm1}	T_{cm2}	T_{cm3}
I	45	27,5	27,5	18	17,875	43,5	20,625	339	395	513
II	40	30	30	16	19,5	42	22,5	341	398	530
III	35	32,5	32,5	14	21,125	40,5	24,375	345	396	531
IV	30	35	35	12	22,75	39	26,25	350	403	517

Результати та їх обговорення

На рис. 1 наведений раманівський спектр скла $40(\text{As}_2\text{S}_3)30(\text{Sb}_2\text{S}_3)30(\text{SbI}_3)$ (II), знятий при низькій потужності лазерного випромінювання. Він містить інтенсивні смуги з максимумами при 165 і 318 см^{-1} , менш виражені смуги при 205 і 480 см^{-1} і особливість у вигляді плеча при 360 - 370 см^{-1} . Подібні спектри спостерігались для всіх досліджених стекел системи As_2S_3 - Sb_2S_3 - SbI_3 , а також для стекел систем As_2S_3 - SbSI [14,17,19], Sb_2S_3 - AsSI [22]. Відмітимо, що положення коливних мод при 205 , 360 - 370 і 480 см^{-1} практично не змінюється при варіації складу стекел $x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$. Смуги при 165 і 318 см^{-1} із збільшенням концентрації стибію та йоду у складі стекел зсуваються у низькочастотну ділянку раманівського спектру. Наприклад, для скла IV максимуми цих смуг знаходяться при 162 і 314 см^{-1} , відпо- відно.

Основні інтенсивні смуги в спектрах комбінаційного розсіювання світла скло- подібних As_2S_3 і Sb_2S_3 знаходяться при 343 см^{-1} [14], і 290 см^{-1} [22] (293 см^{-1} [6]), відпо- відно. Вони обумовлені коливаннями атомів $\text{As}(\text{Sb})$ і S в тригональних пірамідах AsS_3 та SbS_3 , пов'язаних між собою двічі координованими атомами S . Заміщення атомів арсену в As_2S_3 атомами стибію призводить до закономірного зміщення у низькочастотну ділянку спектру смуги при 343 см^{-1} [14,17,22,24]. Це дозволяє нам стверджувати, що смуга при 318 см^{-1} у спектрі скла II обумовлена коливаннями пар атомів в зміша-

них пірамідальних структурних угрупован- нях $\text{As}(\text{Sb})\text{S}_{3/2}$.

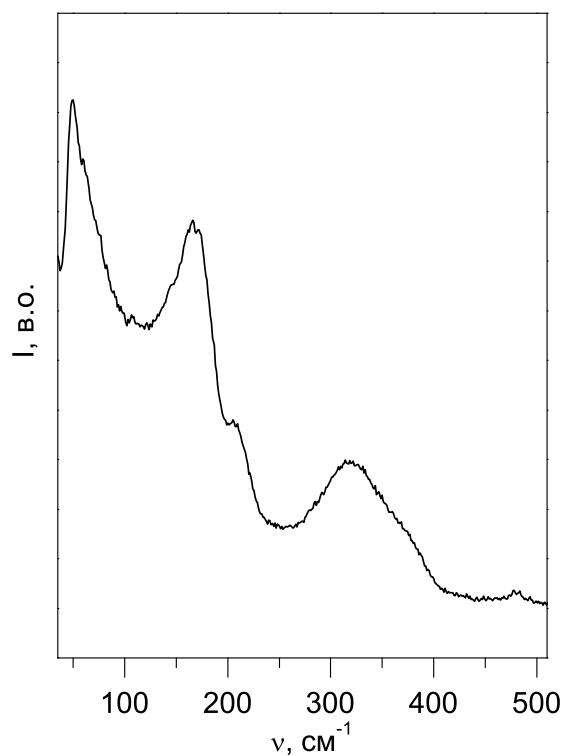


Рис. 1: Раманівський спектр свіжоприготованого скла (II).

Інтенсивна смуга при 165 см^{-1} може бути приписана коливанням пар ато- мів в структурних угрупованнях SbI_3 [4, 14, 17, 22]. На користь даного висновку свід- чить факт зростання її інтенсивності при збільшенні вмісту Sb і I у складі стекел $x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$ з одночасним змі- щенням положення максимуму в ділянку нижчих частот. Відмітимо, що для полікри-

сталічного SbI_3 подібна гостра смуга в раманівському спектрі знаходиться при 157 см^{-1} [14]. Водночас, інтенсивність смуги при 205 см^{-1} , пов'язаної з присутністю в матриці стекел системи $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ структурних угруповань AsI_3 , зменшується. Одержані результати свідчать про те, що в процесах хімічної взаємодії елементів системи найбільш активним є стибій. Зауважимо, що у залежності від співвідношення компонентів, йодиди арсену та стибію можуть входити в структурну сітку скла як у виді дискретних молекул AsI_3 і SbI_3 , так і у виді молекулярних асоціатів $(\text{AsI}_3)_k$ і $(\text{SbI}_3)_k$ [14, 22, 25]. Зважаючи на особливості структури кристалічних AsI_3 і SbI_3 [26], утворення таких ланцюжкових асоціатів, які влітаються у сітку скла, дуже ймовірне.

Особливість при $360\text{--}370 \text{ см}^{-1}$ в раманівських спектрах стекел $x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$ відповідає структурним одиницям As_4S_4 , а слабка смуга при 480 см^{-1} – фрагментом кілець S_8 [14, 24]. В спектрах комбінаційного розсіювання світла стекел системи $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$, як і в спектрах стекел систем $\text{Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ [6], $\text{As}_2\text{S}_3\text{-SbSI}$ [14, 17] та $\text{Sb}_2\text{S}_3\text{-AsSI}$ [22], не виявлено особливостей, які могли б свідчити про наявність в матриці цих стекел потрібних ланцюжкових структурних одиниць $\text{SbS}_{2/2}\text{I}$ (атом Sb зв'язаний з двома атомами S та одним атомом I , а атом S з двома атомами Sb), за допомогою яких побудована кристалічна ґратка сульфойодиду стибію [7].

Наведені дані дозволяють зробити висновок про наногетерогенну («квазіевтектичну») будову стекел $x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$. У побудові їх структурної сітки беруть участь тільки бінарні структурні угруповання $\text{AsS}_{3/2}$, $\text{SbS}_{3/2}$, AsI_3 , SbI_3 , а також незначна кількість молекулярних фрагментів з гомополярними зв'язками As-As та S-S . На користь молекулярного характеру взаємодії між елементами «квазіевтектики» свідчать порівняно низькі температури розм'якшення стекел даної системи [27]. Наявність декількох типів структурних угруповань в матриці стекел призводить до їх взаємної деформації і, як наслідок, до значної нееквівалентності довжин і

сил зв'язків між атомами. Слід відмітити, що подібна ситуація характерна навіть для монокристалів сульфойодиду стибію [7, 28]. Це зумовлює високу податливість стекел до структурних трансформацій при дії зовнішніх чинників (термічна обробка, лазерне опромінення). Саме структурною релаксацією стекел $x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$ та наступною їх кристалізацією можна пояснити аномалії на температурних залежностях діелектричних параметрів [27].

Термографічні дослідження показали, що кристалізація стекел системи $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ проходить у декілька етапів. На кривих ДТА стекел фіксуються по три екзотермічні ефекти. Температури максимумів цих ефектів T_{cm1} , T_{cm2} і T_{cm3} наведені в табл. 1. Видно, що із зміною співвідношення вмісту компонентів у складі стекел значення цих параметрів змінюються слабо. Перший ефект обумовлений утворенням кристалічних зародків сульфойодиду стибію. Про правомірність даного припущення свідчить той факт, що радіус кристалічного зародку SbSI складає всього 0.44 нм [3]. Для склоподібного Sb_2S_3 ця величина рівна 0.64 нм [3]. Скло As_2S_3 навіть при набагато вищих температурах не кристалізується [8]. Тому можна стверджувати, що 2-й екзотермічний ефект пов'язаний із закінченням процесу формування нанокристалів SbSI в скляній матриці. 3-й ефект обумовлений ростом кристалічних включень сульфойодиду стибію. Не виключена можливість формування при таких температурах кристалічних включень сульфиду стибію за рахунок часткової дисоціації йодвміщуючих фрагментів, які беруть участь у побудові структурного каркасу композитів [27, 28].

Для підтвердження припущень, висловлених на основі аналізу кривих ДТА, проведені дослідження дифрактограм і раманівських спектрів відпалених при різних температурах T_g і за різних часів τ_g стекел $x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$. Температури відпалу стекел (348 і 398 K) приблизно відповідають температурам максимумів першого і другого екзотермічних ефектів (табл.1). Час відпалу при $T_g \sim T_{cm1}$ вибирався з урахуванням результатів досліджень процесів фор-

мування нанокристалів SbSI в матриці стекл систем $\text{As}_2\text{S}_3\text{-SbSI}$ та $\text{As}_2\text{Se}_3\text{-SbSI}$ при низьких температурах [17].

Дифрактограми відпалених стекл системи $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ наведені на рис. 2. Для порівняння, на цьому ж рисунку (вставка) наведена дифрактограма полікристалічного SbSI. Як видно з рис. 2, відпал стекл II і III при 348 K призводить до появи на дифрактограмах рефлексів, які засвідчують наявність в їх матриці кристалічних включень певної природи. Для відпаленого при таких же умовах скла IV рефлекси більш виражені. Для скла I слабкі рефлекси проявляються тільки при тривалому відпалі ($\tau_{\text{в}} \geq 48$ год.).

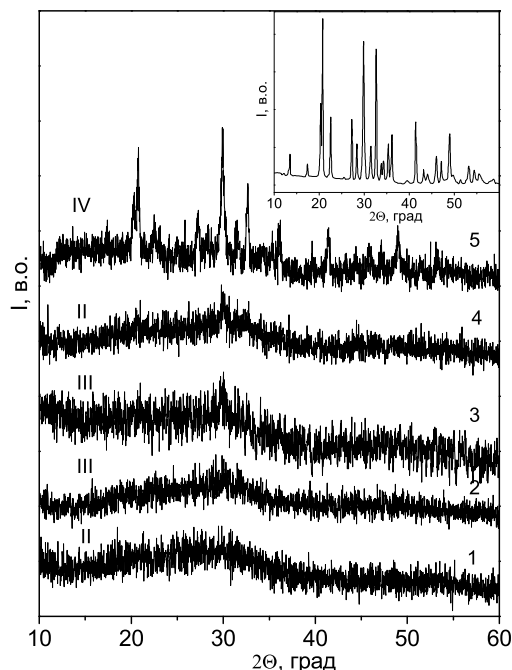


Рис. 2: Дифрактограми відпалених при різних $T_{\text{в}}$ і $\tau_{\text{в}}$ стекл системи $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ (II-IV) та полікристалічного SbSI (вставка). $T_{\text{в}}$, ($\tau_{\text{в}}$: 1 – 348 K, 24 год.; 2 – 348 K, 24 год.; 3 – 348 K, 48 год.; 4 – 348 K, 1 год.; 5 – 398 K, 5 год.

Відпал стекл при більш високій температурі (398 K) супроводжується зростанням кількості та інтенсивності рефлексів (рис. 2). При цьому їх положення на дифрактограмах не змінюється. Це означає, що кількість і, особливо, розміри кристалічних включень у цьому випадку значно більші, ніж при низькотемпературному відпалі. Дослідження показали, що як і у випадку низь-

котемпературного відпалу, рефлекси на дифрактограмах відпалених при 398 K стекл стають більш вираженими при зростанні часу відпалу та концентрації Sb і I у складі стекл. Порівняння дифрактограм відпалених стекл $x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$ з дифрактограмою полікристалічного SbSI (рис. 2, вставка) дозволяє стверджувати, що структура фази, що утворюється в скляній матриці при відпалі, відповідає структурі кристалічного сульфйодиду стибію. Про це свідчить досить добре співпадіння положень рефлексів на дифрактограмах відпалених стекл з положенням інтенсивних ліній на дифрактограмі полікристалічного SbSI.

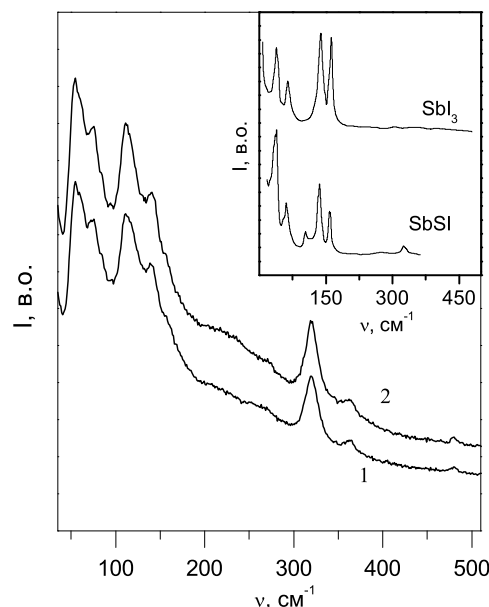


Рис. 3: Раманівські спектри відпаленого при 398 K протягом 2 год (1) і при 348 K протягом 48 год. (2) скла IV та полікристалів SbSI і SbI_3 (вставка).

Такий же висновок випливає з результатів досліджень коливних спектрів відпалених стекл $x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$. На рис. 3 наведені раманівські спектри відпаленого при 398 K протягом 2 год. (крива 1) і при 348 K протягом 48 год. (крива 2) скла IV. Для інших складів одержані подібні результати. На цьому ж рисунку (вставка) наведені раманівські спектри полікристалів SbSI та SbI_3 . Спектри відпаленого за різних умов скла IV містять чітко виражені смуги при 55, 72, 113, 139 і 320 cm^{-1} , слабкі смуги при 362

і 480 см^{-1} та особливості при $150, 220\text{--}230$ і 272 см^{-1} . Для інших складів раманівські спектри практично ідентичні, а різниця в положенні максимумів цих смуг складає $1\text{--}2\text{ см}^{-1}$. Всі ці смуги (за виключенням смуг при 362 і 480 см^{-1} та особливості при $220\text{--}230\text{ см}^{-1}$) виявлені в раманівських спектрах полікристалу SbSI ($56, 108, 138, 157, 272$ і 318 см^{-1}) (рис. 3, вставка) та монокристалу SbSI, виміряних при 300 К в різних конфігураціях ($51, 66, 107, 137, 149, 319\text{ см}^{-1}$) [29, 30]. Це свідчить про те, що структура кристалічної фази, яка формується в матриці стекел системи $\text{As}_2\text{S}_3\text{--Sb}_2\text{S}_3\text{--SbI}_3$ при їх відпалі, відповідає структурі сульфойодиду стибію.

Як уже відмічалось, смуга при 480 см^{-1} пов'язана з присутністю в матриці стекел $x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$ фрагментів кілець сірки. Смуга при 362 см^{-1} відповідає структурним одиницям As_4S_4 [24]. При цьому відмітимо, що у відпалених стеклах з більшим вмістом As_2S_3 її інтенсивність вища. Про наявність в структурі відпалених стекел системи $\text{As}_2\text{S}_3\text{--Sb}_2\text{S}_3\text{--SbI}_3$ значної кількості структурних одиниць з гомополярними зв'язками As-As і S-S може свідчити присутність в раманівських спектрах особливостей при 150 та $220\text{--}230\text{ см}^{-1}$. Підтвердженням даного висновку можуть служити результати досліджень спектрів комбінаційного розсіювання світла склоподібного сульфиду миш'яку, одержаного жорстким гартуванням розплаву [24]. В спектрах даного матеріалу проявляються смуги при 220 і 231 см^{-1} , які відповідають коливанням пар атомів в структурних угрупованнях S_8 і As_4S_4 , та смуга при 150 см^{-1} , яку можна віднести до коливань ланцюжків сірки.

Цікава природа смуги при 272 см^{-1} в раманівських спектрах відпалених стекел $x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$ (рис. 3). Вона відсутня в раманівських спектрах кристалів і стекел As_2S_3 , α - і β - As_4S_4 , однак спостерігається в спектрах парів As_2S_3 , сублімованих кристалічних плівок As_4S_3 , плівок As_2S_3 , одержаних в дуже нерівноважних умовах напilenня, та плівок As_2S_3 , напilenних на підкладки з хромом [24]. Це дозволяє зробити припущення, що при структурній перебудові, яка проходить в стеклах системи

$x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$ при їх нагріванні чи відпалі, не виключена можливість утворення деякої кількості молекулярних груп As_4S_3 з гомополярними зв'язками As-As.

Одержані результати досліджень кривих ДТА, дифрактограм і раманівських спектрів дозволяють стверджувати, що формування потрібних ланцюжкових одиниць $\text{SbS}_{2/2}\text{I}$, характерних для кристалічного SbSI, в матриці стекел систем $\text{As}_2\text{S}_3\text{--Sb}_2\text{S}_3\text{--SbI}_3$ відбувається в результаті їх структурної релаксації при розм'якшенні, яка супроводжується розривом та перемиканням гомополярних і гетерополярних хімічних зв'язків у бінарних структурних угрупованнях, якими визначається будова стекел даної системи. При цьому, структурна перебудова супроводжується дифузією атомів на відстані порядку міжатомних.

Одночасно з формуванням нанокристалічних включень SbSI в скляній матриці відбувається і структурна перебудова самої матриці. Про це свідчать суттєві відмінності в раманівських спектрах свіжоприготованих і відпалених стекел. В спектрах відпалених стекел з'являються слабкі особливості при 150 см^{-1} і розмита особливість в ділянці $220\text{--}230\text{ см}^{-1}$ (рис. 3), а особливість при $360\text{--}370\text{ см}^{-1}$ у спектрі свіжоприготованого скла (рис. 1) трансформується у доволі виражену смугу при 362 см^{-1} (рис. 3). Як уже відмічалось, інтенсивність цієї смуги при збільшенні вмісту сульфиду арсену у складі стекел зростає. Наведені дані дозволяють припустити, що матриця відпалених стекел, в якій сформовані кристалічні включення SbSI різної розмірності, визначається в основному структурними одиницями As_4S_4 та фрагментами ланцюжків і кілець сірки. Не виключена можливість участі у формуванні структурної сітки і молекулярних груп As_4S_3 .

Висновки

Встановлено, що стекла системи $\text{As}_2\text{S}_3\text{--Sb}_2\text{S}_3\text{--SbI}_3$ мають наногетерогенну будову. Їх матриця побудована тільки бінарними структурними угрупованнями $\text{As}(\text{Sb})_{3/2}$, містить окремі молекули AsI_3 , SbI_3 або асо-

ціати на їх основі та незначну кількість структурних фрагментів з гомополярними зв'язками As-As і S-S. Кристалізація стекел проходить у декілька етапів. При нагріванні (відпалі) стекел відбувається розрив і перемикання хімічних зв'язків в угрупованнях, які визначають їх структуру ближнього порядку, та формуванням нанокристалів сульфойодиду стибію. Змінюється при цьому і

структура скляної матриці. Вона визначається в основному структурними угрупованнями As_4S_4 , пов'язаними між собою за допомогою фрагментів ланцюжків або кілець атомів сірки. Із збільшенням температури і часу відпалу розміри кристалічних включень сульфойодиду стибію в скляній матриці зростають.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Герзанич Е.И. Сегнетоэлектрики типа $\text{A}^V\text{B}^{VI}\text{C}^{VII}$ / Е.И. Герзанич, В.М. Фридкин. — Москва: Наука, 1982. — 228 с.
- [2] Rubish V.M. Thermo-stimulated relaxation of SbSI glass matrix / V.M. Rubish // *J. Optoelectronics Advanced Mat.* — 2001. — V.3. — N 4. — P. 941–944.
- [3] Rubish V.M. Crystallization parameters of non-crystalline antimony chalcogenides / V.M. Rubish, M.V. Dobosh, P.P. Shtets *et. al.* // *J. Phys. Studies.* — 2004. — V.8. — N 2. — P. 178–182.
- [4] Rubish V.M. Investigation of glass structure in As(Sb)-S(Se)-I systems by the methods of Raman spectroscopy and X-ray diffraction / V.M. Rubish, I. Yurkin, V. Malesh *et. al.* // *Proc. SPIE.* — 1995. — V. 2648. — P. 529–536.
- [5] Рубіш В.М. Структура ближнього порядку у склах системи $\text{Sb}_2\text{S}_3\text{—SbI}_3$ / В.М. Рубіш, П.П. Штець, В.В. Рубіш, Д.Г. Семак // *Вісник Ужгород. ун-ту. Серія Фізика.* — 2000. — Вип. 7. — С. 58–62.
- [6] Turyanitsa I.D. Raman spectra and dielectric properties of glasses of the Sb-S-I system / I.D. Turyanitsa, L.K. Vodop'yanov, V.M. Rubish *et. al.* // *J. Appl. Spectroscopy.* — 1986. — V. 44. — N 5. — P. 501–504.
- [7] Grigas J. Splitting of the XPS in ferroelectric SbSI crystals / J. Grigas, E. Talik, V. Lazauskas // *Ferroelectrics.* — 2003. — V. 284. — P.147–160.
- [8] Шпак А.П. Склоутворення і властивості сплавів в халькогенідних системах на основі миш'яку та сурми / А.П. Шпак, В.М. Рубіш. — Київ: ІМФ, НАНУ, 2006. — 120 с.
- [9] Rubish V.M. Obtaining and crystallization peculiarities of antimony containing chalcogenide glasses / V.M. Rubish, M.Yu. Rigan, S.M. Gasinets *et. al.* // *Ferroelectrics.* — 2008. — V. 372. — No. 1. — P. 87–92.
- [10] Рубіш В.М. Формування сегнетоелектричних включень в матриці халькогенідного скла / В.М. Рубіш, О.Г. Гуранич, Д.С. Леонов // *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології.* — 2005. — Т. 3. — N 4. — С. 911–920.
- [11] Рубіш В.М. Аномальна поведінка діелектричної проникності халькогенідних стекел в околі температури кристалізації / В.М. Рубіш // *Сенсорна електроніка і мікросистемні технології.* — 2007. — Т. 1. — С. 62–66.
- [12] Рубіш В.М. Особливості одержання і кристалізації стекел на основі сульфойодиду сурми / В.М. Рубіш // *Фіз. і хімія тв. тіла.* — 2007. — Т. 8. — N 1. — С. 41–46.

- [13] Kaynts D.I. Formation of ferroelectric nanostructures in $(\text{As}_2\text{S}_3)_{100-x}(\text{SbSI})_x$ glassy matrix / D.I. Kaynts, A.P. Shpak, V.M. Rubish *et. al.* // *Ferroelectrics*. – 2008. – V. 371. – N 1. – P. 28–33.
- [14] Рубіш В.М. Дослідження структури стекл системи As-Sb-S-I методом КР-спектроскопії / В.М. Рубіш, В.О. Стефанович, О.Г. Гуранич *та ін.* // *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. – 2008. – Т. 6. – N 4. – С. 1119–1127.
- [15] Рубіш В.М. Склоутворення, кристалізація і фізико-хімічні властивості сплавів в системах на основі SbSI / В.М. Рубіш, М.Ю. Риган, В.П. Перевузік *та ін.* // *Фіз. і хімія тв. тіла*. – 2009. – Т. 10. – N 4. – С. 861–866.
- [16] Shpak A.P. Optical properties and local structure of $(\text{As}_2\text{S}_3)_{100-x}(\text{SbSI})_x$ glasses / A.P. Shpak, V.M. Rubish, O.A. Mykaylo *et. al.* // *Ukr. J. Phys. Opt.* – 2010. – V. 11. – N 2. – P. 107–113.
- [17] Barj M. Formation and structure of crystalline inclusions in As_2S_3 -SbSI and As_2Se_3 -SbSI systems glass matrices / M. Barj, O.A. Mykaylo, D.I. Kaynts *et. al.* // *J. Non-Cryst. Solids*. – 2011. – V. 357. – P. 2232–2234.
- [18] Rubish V.M. Crystallization study of $(\text{As}_2\text{S}_3)_{100-x}(\text{SbSI})_x$ amorphous films by optical method / V.M. Rubish, O.V. Kozusenok, P.P. Shtets *et. al.* // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. – 2012. – V. 15. – N 3. – P. 294–297.
- [19] Azhniuk Yu.M. Photoinduced changes in the structure of As_2S_3 -based SbSI nanocrystal-containing composites studied by Raman spectroscopy / Yu.M. Azhniuk, P. Bhandivad, V.M. Rubish *et. al.* // *Ferroelectrics*. – 2011. – V. 416. – P. 113–118.
- [20] Azhniuk Yu.M. SbSI nanocrystal formation in As-Sb-S-I glass under laser beam / Yu.M. Azhniuk, V. Stoyka, I. Petryshynets *et. al.* // *Mat. Res. Bull.* – 2012. – V. 47. – P. 1520–1522.
- [21] Azhniuk Yu.M. Raman and AFM studies of $(\text{As}_2\text{S}_3)_{0.45}(\text{SbSI})_{0.55}$ thin films and bulk glass / Yu.M. Azhniuk, A. Villabona, A.V. Gomonnai *et. al.* // *J. Non-Cryst. Sol.* – 2014. – V. 396–397. – P. 36–40.
- [22] Рубіш В.М. Механізм формування і природа кристалічних включень в матриці стекл системи Sb_2S_3 -AsSI / В.М. Рубіш, В.М. Мар'ян, В.О. Стефанович *та ін.* // *Фіз. і хімія тв. тіла*. – 2013. – Т. 14. – N 1. – С. 70–74.
- [23] Rubish V.M. The influence of obtaining and heat treatment conditions on the structure of As_2S_3 -SbSI system / V.M. Rubish, L. Bih, O.A. Mykaylo *et. al.* // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. – 2013. – V. 16. – No. 2. – P. 123–127.
- [24] Петров В.В. Материалы перспективных оптоэлектронных устройств / В.В. Петров, А.А. Крючин, В.М. Рубиш. – Київ: Наукова думка, 2012. – 336 с.
- [25] Koudelká L. Raman spectra and structure of As-S-I system glasses / L. Koudelká, M. Pisárčik. // *J. Non-Cryst. Solids*. – 1984. – V. 64. – N 1. – P. 87–94.
- [26] Ролстен Р.Ф. Иодидные металлы и иодиды металлов / Р.Ф. Ролстен. – Москва: Металлургия, 1968. – 524 с.
- [27] Rubish V.M. Thermoinduced formation of SbSI crystallites in As_2S_3 - Sb_2S_3 - SbI_3 glass matrix / V.M. Rubish, S.M. Gasynets, O.V. Gorina *et. al.* // *Abstr. V Ukrainian-Polish-Lithuanian Meeting on Physics of Ferroelectrics (UPLMF-V)*. – Uzhgorod, Ukraine. – 2018. – P. 86.

- [28] Рубіш В.М. Вплив умов відпалу на структуру і властивості стекол $(\text{As}_2\text{Se}_3)_{100-x}(\text{SbSI})_x$ та композитів на їх основі / В.М. Рубіш, С.М. Гасинець, О.В. Горіна та ін. // Науковий вісник УжНУ. Серія Фізика. — 2017. — Вип. 41. — С. 68–78.
- [29] Perry C.H. The Raman spectrum of ferroelectric SbSI / C.H. Perry, D.K. Agrawal // Solid State Communs. — 1970. — V. 8. — P. 225–230.
- [30] Teng M.K. Optical phonon analysis in the $A^V B^V I C^{VII}$ compounds / M.K. Teng, M. Balkanski, M. Massot, M. Ziolkiewicz // Phys. Status Solidi (b). — 1974. — V. 62. — P. 173–182.

Стаття надійшла до редакції 30.07.2019

В.М. Рубиш¹, С.М. Гасинець¹, А.М. Грещук², Л.И. Макарь¹, О.А. Михайло¹, Р.П. Писак¹, И.М. Ризак¹, А.М. Соломон³, В.А. Юхимчук², Т.И. Ясинко¹

¹Ужгородская лаборатория материалов оптоэлектроники и фотоники Института проблем регистрации информации НАН Украины, 88000, Ужгород, ул. Замковые сходы, 4, Украина, e-mail: center.uzh@gmail.com

²Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева НАН Украины, 03028, Киев, пр. Науки, 45, Украина

³Институт электронной физики НАН Украины, 88017, Ужгород, ул. Университетская, 21, Украина

СТРУКТУРА СТЕКОЛ И КОМПОЗИТОВ В СИСТЕМЕ As_2S_3 - Sb_2S_3 - SbI_3

Приведены результаты микрорамановских, X-лучевых и термографических исследований свежеприготовленных и отожженных стекол в системе As_2S_3 - Sb_2S_3 - SbI_3 . Установлено наногетерогенное строение стекол. Кристаллизация стекол происходит в несколько этапов. Структура фазы, которая формируется в матрице стекла в процессе кристаллизации, соответствует структуре кристаллического сульфидида стибия. Размеры кристаллических включений SbSI зависят от термочасовых режимов обработки стекол.

Ключевые слова: халькогалогенидные стекла, рамановские спектры, структура, кристаллизация, сегнетоэлектрики.

V.M. Rubish¹, S.M. Hasynets¹, O.M. Hreshchuk², L.I. Makar¹, O.A. Mykaylo¹, R.P. Pisak¹, I.M. Rizak¹, A.M. Solomon³, V.O. Yukhymchuk², T.I. Yasinko¹

¹Uzhhorod laboratory of optoelectronic and photonics materials of the Institute for Information Recording, NAS of Ukraine, 88000, Uzhhorod, Zamkovi Skhody Str., 4, Ukraine, e-mail: center.uzh@gmail.com

²V.E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 03028, Kyiv, Prospekt Nauky, 41, Ukraine

³Institute of Electronic Physics, NAS of Ukraine, 88017, Uzhhorod, Universitetskaya Str., 21, Ukraine

STRUCTURE OF GLASSES AND COMPOSITES IN As_2S_3 - Sb_2S_3 - SbI_3 SYSTEM

Purpose. Composites on the basis $x(\text{As}_2\text{S}_3)y(\text{Sb}_2\text{S}_3)z(\text{SbI}_3)$ glasses are suitable for creation of ferroelectric glass-ceramics, nonlinear dielectrics, memory media, elements for infrared and nonlinear optics, various sensors. This paper

presents the results of thermal, X-ray diffraction and Raman studies of the conditions of formation and nature of crystalline inclusions in the glass matrix of the $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ system during their thermal treatment.

Methods. Differential thermal analysis (DTA), Raman and X-Ray diffraction spectroscopy. DTA curves were carried out in the temperature interval of 293–700 K. Heating rate was equal 3 K/min.

Results. Danoheterogenous structure of glasses in $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ system established on the basis of Raman spectra investigations. Their structural network is formed by only binary structural groups with heteropolar bonds ($\text{AsS}_{3/2}$, $\text{SbS}_{3/2}$, SbI_3 , AsI_3) and contains a certain amount molecular fragments with homopolar As-As and S-S bonds (As_4S_4 , S_8).

It has been established that the crystallization of glasses takes place in several stages. DTA curves of glasses recorded at 3 K/min revealed three exothermic effects. For example, for $40(\text{As}_2\text{S}_3)30(\text{Sb}_2\text{S}_3)30(\text{SbI}_3)$ glass temperatures maxima of these effects are equal 341, 398 and 530 K. The first and second effects are less pronounced due to nucleus formation and the formation of nanocrystals in glass matrix.

The structure of the phase that arises in the glass matrix at annealing (348 and 398 K) corresponds to the structure of the crystalline SbSI. The formation of triple units $\text{SbS}_{2/2}\text{I}$ occurs as a result of the glass structural relaxation during its softening, which is accompanied by breaking and switching of homopolar and heteropolar chemical bonds in the binary groups that form the structural network of glasses. This process is accompanied by the diffusion of atoms in a distances of interatomic order. The sizes of antimony sulfoiodide crystalline inclusions increase with annealing temperature and annealing time. The matrixes of the annealed $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ system glasses, in which crystalline SbSI inclusions of different dimensions are formed, are determined mainly by As_4S_4 structural groups linked together by fragments of chains or rings of sulfur atoms.

Conclusions. DTA curves, X-ray powder diffraction patterns and Raman spectra of glasses in $\text{As}_2\text{S}_3\text{-Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ were investigated. The nanoheterogeneous structure of glasses was established. The crystallization of glasses takes place in several stages. The structure of the phase that arises in the glass matrix at annealing corresponds to the structure of crystalline antimony sulfoiodide. The sizes of SbSI crystalline inclusions are dependent on the heat treatment regimes.

Keywords: chalcogenide glasses, Raman spectra, structure, crystallization, ferroelectrics.

REFERENCES

- [1] Gerzanich, E.I., Friedkin, V.M. (1982), «Ferroelectrics $A^V B^{VI} C^{VII}$ » [«Sehnetoelektryky typu AVBVICVII»], Moscow, Nauka, 228 p.
- [2] Rubish, V.M. (2001), «Thermo-stimulated relaxation of SbSI glass matrix», J. Optoelectronics Advanced Mat., V. 3, N 4, pp. 941–944.
- [3] Rubish, V. M., Dobosh, M. V., Shtets, P. P. *et. al.* (2004), «Crystallization parameters of non-crystalline antimony chalcogenides», J. Phys. Studies, V. 8, N 2, pp. 178–182.
- [4] Rubish, V. M., Yurkin, I., Malesh, V. *et. al.* (1995), «Investigation of glass structure in As(Sb)-S(Se)-I systems by the methods of Raman spectroscopy and X-ray diffraction», Proc. SPIE, V. 2648, pp. 529–536.
- [5] Rubish, V.M., Shtets, P.P., Rubish, V.V., Semak, D.H. (2000), «The short-order structure of glasses in $\text{Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ system» [«Struktura blyznoho poriadku u sklakh systemy $\text{Sb}_2\text{S}_3\text{-SbI}_3$ »], Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Physics [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fiz.], Iss. 7, pp. 58–62.
- [6] Turyanitsa, I. D., Vodop'yanov, L. K., Rubish, V. M. *et. al.* (1986), «Raman spectra and dielectric properties of glasses of the Sb-S-I system», J. Appl. Spectroscopy, V. 44, Iss. 5, pp. 501–504.
- [7] Grigas, J., Talik, E., Lazauskas, V. (2003), «Splitting of the XPS in ferroelectric SbSI crystals», Ferroelectrics, V. 284, pp. 147–160.

- [8] Shpak, A.P., Rubish, V.M. (2006), «Glass-formation and properties of alloys in chalcogenide systems based on arsenic and antimony» [«Skloutvorennia i vlastyvoli splaviv v khalkohenidnykh systemakh na osnovi mysh'iaku ta surmy»], Kyiv IMF, NANU, 120 p.
- [9] Rubish, V. M., Rigan, M. Yu., Gasinets, S. M. *et. al.* (2008), «Obtaining and crystallization peculiarities of antimony containing chalcogenide glasses», *Ferroelectrics*, V. 372, Iss. 1, pp. 87–92.
- [10] Rubish, V.M., Guranych, O.G., Leonov, D.S. (2005), «Formation of the ferroelectric inclusions in the matrix of chalcogenide glass» [«Formuvannia sehnetoelektrychnykh vkluchen v matrytsi khalkohenidnoho skla»], *Nanosystems, nanomaterials, nanotechnologies* [Nanosystemy, nanomaterialy, nanotekhnolohii], V. 3, N 4, pp. 911–920.
- [11] Rubish, V.M. (2007), «Anomalous behavior of dielectric permittivity of chalcogenide glasses in crystallization temperature range» [«Anomalna povedinka dielektrychnoi pronyknosti khalkohenidnykh stekol v okoli temperatury krystalizatsii»], *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*, N 1, pp. 62–66.
- [12] Rubish, V.M. (2007), Peculiarities of Obtaining and Crystallization of Glasses on Basis Antimony Sulphoiodide [Osoblyvosti oderzhannia i krystalizatsii stekol na osnovi sulfoiodydu surmy], *Physics and Chemistry of Solid State* [Fiz. i khimiia tv. tila], V. 8, N 1, pp. 41–46.
- [13] Kaynts, D. I., Shpak, A. P., Rubish, V. M. *et. al.* (2008), «Formation of ferroelectric nanostructures in $(As_2S_3)_{100-x}(SbSI)_x$ glassy matrix», *Ferroelectrics*, V. 371, Iss. 1, pp. 28–33.
- [14] Rubish, V.M., Stefanovych, V.O., Guranych, O.G. *et. al.* (2008), «Investigation of Structure of As-Sb-S-I System Glasses by Raman Spectroscopy Method» [«Doslidzhennia struktury stekol systemy As-Sb-S-I metodu KR-spektroskopii»], *Nanosystems, nanomaterials, nanotechnologies* [Nanosystemy, nanomaterialy, nanotekhnolohii], V. 6, N 4, pp. 1119–1127.
- [15] Rubish, V.M., Rigan, M., Perevuznyk, V.P. *et. al.* (2009), «Glassforming, crystallization and physical-chemical properties of alloys in systems SbSI based» [«Skloutvorennia, krystalizatsiia i fizyko-khimichni vlastyvoli splaviv v systemakh na osnovi SbSI»], *Physics and Chemistry of Solid State* [Fiz. i khimiia tv. tila], V. 10, N 4, pp. 861–866.
- [16] Shpak, A. P., Rubish, V. M., Mykaylo, O. A. *et. al.* (2010), «Optical properties and local structure of $(As_2S_3)_{100-x}(SbSI)_x$ glasses», *Ukr. J. Phys. Opt.*, V. 11, N 2, pp. 107–115.
- [17] Barj, M., Mykaylo, O.A., Kaynts, D.I. *et. al.* (2011), «Formation and structure of crystalline inclusions in As_2S_3 -SbSI and As_2Se_3 -SbSI systems glass matrices», *J. Non-Cryst. Solids*, V. 357, pp. 2232–2234.
- [18] Rubish, V.M., Kozusenok, O.V., Shtets, P.P. *et. al.* (2012), «Crystallization study of $(As_2S_3)_{100-x}(SbSI)_x$ amorphous films by optical method», *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics.*, V. 15, N 3, pp. 294–297.
- [19] Azhniuk, Yu. M., Bhandiwad, P., Rubish, V. M. *et. al.* (2011), «Photoinduced changes in the structure of As_2S_3 -based SbSI nanocrystal-containing composites studied by Raman spectroscopy», *Ferroelectrics*, V. 416, Iss. 1, pp. 113–118.
- [20] Azhniuka, Yu.M., Stoyka, V., Petryshynets, I. *et. al.* (2012), «SbSI nanocrystal formation in As-Sb-S-I glass under laser beam», *Mat. Res. Bull.*, V. 47, Iss. 6, pp. 1520–1522.
- [21] Azhniuk, Yu.M., Villabona, A., Gomonnai, A.V. *et. al.* (2014), «Raman and AFM studies of $(As_2S_3)_{0.45}(SbSI)_{0.55}$ thin films and bulk glass», *J. Non-Cryst. Sol.*, V. 396-397, pp. 36–40.

- [22] Rubish, V.M., Marjan, V.M., Stefanovich, V.O. *et. al.* (2013), «Formation Mechanism and Nature of Crystalline Inclusions in the Matrix of Sb_2S_3 -AsSI System Glasses» [«Mekhanizm formuvannya i pryroda krystalichnykh vkluchen v matrytsi stekol systemy Sb_2S_3 -AsSI»], Physics and Chemistry of Solid State [Fiz. i khimia tv. tila], V. 14, N 1, pp. 70–74.
- [23] Rubish, V.M., Bih, L., Mykaylo, O.A. *et. al.* (2013), «The influence of obtaining and heat treatment conditions on the structure of As_2S_3 -SbSI system», Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics., V. 16, N 2, pp. 123–127.
- [24] Petrov, V.V., Kryuchyn, A.A., Rubish, V.M. (2012), «Materials promising optoelectronic devices» [«Materyaly perspektyvnykh optoelektronnykh ustroystv»], Kyev, Naukova dumka, 336 p.
- [25] Koudelká, L., Pisárčik, M. (1984), «Raman spectra and structure of As-S-I system glasses», J. Non-Cryst. Solids, V. 64, Iss. 1-2, pp. 87–94.
- [26] Rolsten, R.F. (1968), «Iodide metals and metal iodides» [«Yodidnye metally i jodydy metallov»], Moskva, Metallurgy, 524 p.
- [27] Rubish, V.M. , Gasynets, S.M. , Gorina, O.V. *et.al.* (2018), «Thermoinduced formation of SbSI crystallites in As_2S_3 - Sb_2S_3 -SbI₃ glass matrix», Abstr. V Ukrainian-Polish-Lithuanian Meeting on Physics of Ferroelectrics (UPLMF-V), Uzhgorod, Ukraine, p. 86.
- [28] Rubish, V.M., Gasynets, S.M., Gorina, O.V. *et. al.* (2017), «The influence of heat treatment conditions on the structure and properties of $(\text{As}_2\text{Se}_3)_{100-x}(\text{SbSI})_x$ glasses and composites on their basis» [«Vplyv umov vidpalu na strukturu i vlastyvoli stekol $(\text{As}_2\text{Se}_3)_{100-x}(\text{SbSI})_x$ ta kompozytiv na yikh osnovi»], Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Physics. [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fiz.], Iss. 41, pp. 68-78.
- [29] Perry, C.H., Agrawal, D.K. (1970), «The Raman spectrum of ferroelectric SbSI», Solid State Communs., V. 8, Iss. 4, pp. 225–230.
- [30] Teng, M.K., Balkanski, M. , Massot, M., Ziolkiewicz, M.K. (1974), «Optical phonon analysis in the $\text{A}^V\text{B}^{VI}\text{C}^{VII}$ compounds», Phys. Status Solidi (b), V. 62, Iss. 1, pp. 173–182.

©Ужгородський національний університет

УДК 539.172.2
PACS 25.20.DC
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.39-49

В.М. Мазур, З.М. Біган, П.С. Деречкей, Д.М. Симочко

Інститут електронної фізики НАН України, 88000, м. Ужгород, вул. Університетська, 21, Україна,
e-mail: derecskei89@gmail.com

ДОСЛІДЖЕННЯ ЗБУДЖЕННЯ ІЗОМЕРНОГО СТАНУ $11/2^-$ ЯДРА ^{137}Ba В РЕАКЦІЇ $(\gamma, \gamma')^m$

Виконане теоретичне та експериментальне дослідження перерізу збудження ізомерного стану $11/2^-$ ядра ^{137}Ba в реакції $(\gamma, \gamma')^m$. Експериментальне дослідження проводилося на гальмівному пучку мікротрону М-30 в області енергій 4–17 МеВ.

Ключові слова: атомне ядро, ядерні реакції, переріз, гігантський дипольний резонанс, гальмівний гамма-спектр, ізомерне відношення.

Вступ

Процеси розсіювання гамма-квантів атомними ядрами зв'язані з основними проблемами ядерної фізики: структурою ядра і механізмами його збудження. Цими обставинами в значній мірі і визначається постійний інтерес дослідників до даної проблеми [1].

Розсіювання фотонів атомними ядрами є універсальним процесом, що відбувається на всіх ядрах і при всіх енергіях. Воно може відбуватися із зміною (непружне) і без зміни енергії фотона (пружне). Ізомерні ядерні рівні збуджуються в neprужних процесах.

В останній час помітно зріс інтерес до вивчення збудження ізомерних станів ядер в реакціях (γ, γ') , як з точки зору вивчення їх механізмів збудження та уточнення перерізів збудження реакцій $(\gamma, \gamma')^m$, так і з метою їх прикладного використання в т.ч. в активаційних аналізах [2–4]. Відомо, що реакції $(\gamma, \gamma')^m$ йдуть зі значною ймовірністю при енергіях гамма-квантів нижче порогів (γ, n) або (γ, p) реакцій, які є джерелом утворення радіоактивних ядер і відповідно заважаючого гамма-фону. При такому використанні реакції (γ, γ') зовсім не активують широко розповсюджені елементи, які зазвичай присутні в дослідних зразках матриці. Тому виявляється можливим досягнути високої чут-

ливості активаційного аналізу, недивлячись на присутність значних домішок сторонніх елементів.

Дана робота присвячена експериментальному і теоретичному дослідженням перерізу збудження ізомерного стану ядра ^{137}Ba в реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$ в області Е1-гігантського резонансу. Метастабільний стан ^{137}Ba має спін-парність $11/2^-$, енергію $E = 0,661$ МеВ і період напіврозпаду $T_{1/2} = 2,55$ хв [5].

Методика експерименту

Робота виконувалася на пучку гальмівних гамма-квантів мікротрону М-30 ІЕФ НАН України в області енергій 4 – 17 МеВ. Розкид енергій прискорених електронів становив $\pm(5 - 20)$ кеВ і визначався фазовими коливаннями, амплітуда яких при числі орбіт $n > 3$ практично не залежить від їх числа [6].

Зміна енергії прискорених електронів здійснювалась двома методами: у широких межах – зміною числа орбіт, які проходять електрони, тобто зміною числа хвильоводних вставок і в малих межах – зміною величини провідного магнітного поля і відповідною зміною величини прискорювального потенціалу в резонаторі. Індукція магніт-

ного поля вимірювалася методом ядерного магнітного резонансу, при цьому похибка виміру не перевищувала $\pm 0,1\%$.

Більш ранні роботи з вивчення перерізів реакції $(\gamma, \gamma')^m$ виконувалися на бетатронах і синхротронах [7–9]. При відносно меншій інтенсивності гальмівного гамма-пучка важливою властивістю і перевагою цих експериментів була незмінність напрямку прольоту гамма-пучка. Перевагою мікротрону є суттєво більша інтенсивність гальмівного гамма-випромінювання (~ 2 порядки). Але при зміні енергії прискореного електронного пучка шляхом зміни напруженості провідного магнітного поля відбувається деяка зміна напрямку пучка, що вимагає контролю і корекції.

Пучок прискорених електронів, що виводився з прискорювача падав на танталову гальмівну мішень товщиною 0,5 мм. Для контролю електронного пучка використовувався монітор вторинної емісії, розташований безпосередньо перед вікном виводу пучка з мікротрону. Гальмівний пучок формувався залізним коліматором товщиною 30 см. Для очищення γ -пучка від електронів використовувався графітовий поглинач товщиною 7 см. В якості прохідного монітора гамма-пучка використовувалася іонізаційна камера, розташована безпосередньо перед досліджуванним зразком. Вона калібрувалася товстостінною алюмінієвою абсолютною камерою з об'ємом чутливої щілини $4,38 \text{ см}^3$ [10, 11], апаратурна функція якої враховувала наявність в пучку графітового поглинача.

Вимірювання зводилося до наступної процедури: в момент установки дослідного зразка в пучок одночасно включалася реєстрація інтенсивності гамма-випромінювання, що пройшло через дослідну мішень. Після встановленого часу опромінення зразок доставлявся транспортним пристроєм в вимірювальний блок на гамма-спектрометр. Всі операції: установка зразка на опромінення, транспортування, вимірювання наведеної активності, час вимірювання здійснювалися автоматично. Ідентифікація заселеності ізомерних рівнів ^{137}Ba здійснювалася по

лінії з енергією 0,661 MeV. Більш детально методика експерименту приведена в роботах [12, 13].

Досліджувані мішені являли собою диски порошкоподібного вуглекислого барію BaCO_3 вагою 2 г запресовані в капролонові касети діаметром 30 мм. Використовувалися ізотопічно збагачені зразки Барію. При цьому при дослідженні реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$ в склад мішені входили $(82,2 \pm 0,05)\%$ ізоотопу ^{137}Ba і $(17,49 \pm 0,02)\%$ ізоотопу ^{138}Ba .

Оскільки в досліджуваних зразках ^{137}Ba був присутній в якості домішки ізоотоп ^{138}Ba , то паралельно з вимірюванням виходу реакції (γ, γ') вище порогу реакції (γ, n) проводилося вимірювання виходу реакції $^{138}\text{Ba}(\gamma, n)^{137m}\text{Ba}$ (мішень складалася з $(99,8 \pm 0,05)\%$ процентів ізоотопу ^{138}Ba), що дозволяло вносити відповідні поправки у вихід реакції $(\gamma, \gamma')^m$.

Експериментальні результати і їх аналіз

Експериментальна крива вимірювання виходу реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$ проводилися з кроком 0,5 MeV і була використана для розрахунку перерізу $\sigma_m(E)$ реакції $(\gamma, \gamma')^m$. Обчислення проводилося методом Пенфолда-Лісса [11] з кроком $E = 1 \text{ MeV}$. Одержаний переріз реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$ приведений на рис. 1. Вказані на рис. 1 похибки стандартні. Як видно з рис. 1 переріз реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$ в інтервалі енергій гамма-квантів 5 – 18 MeV має двогорбий характер. Перший максимум при енергії 7,0 MeV досягає $0,78 \pm 0,04 \text{ мб}$, другий – широкий максимум при енергії $\sim 15,0 \text{ MeV}$ становить $0,22 \pm 0,10 \text{ мб}$.

З метою порівняння одержаних експериментальних даних з теоретичними розрахунками нами за допомогою програмного пакета TALYS – 1.9 [14] розрахований повний переріз розсіювання гамма-квантів σ_{scat}^{tot} на ядрі ^{137}Ba . Програма TALYS – 1.9 – зібраний в одному коді пакет сучасних моделей, що описують процес ядерних реакцій.

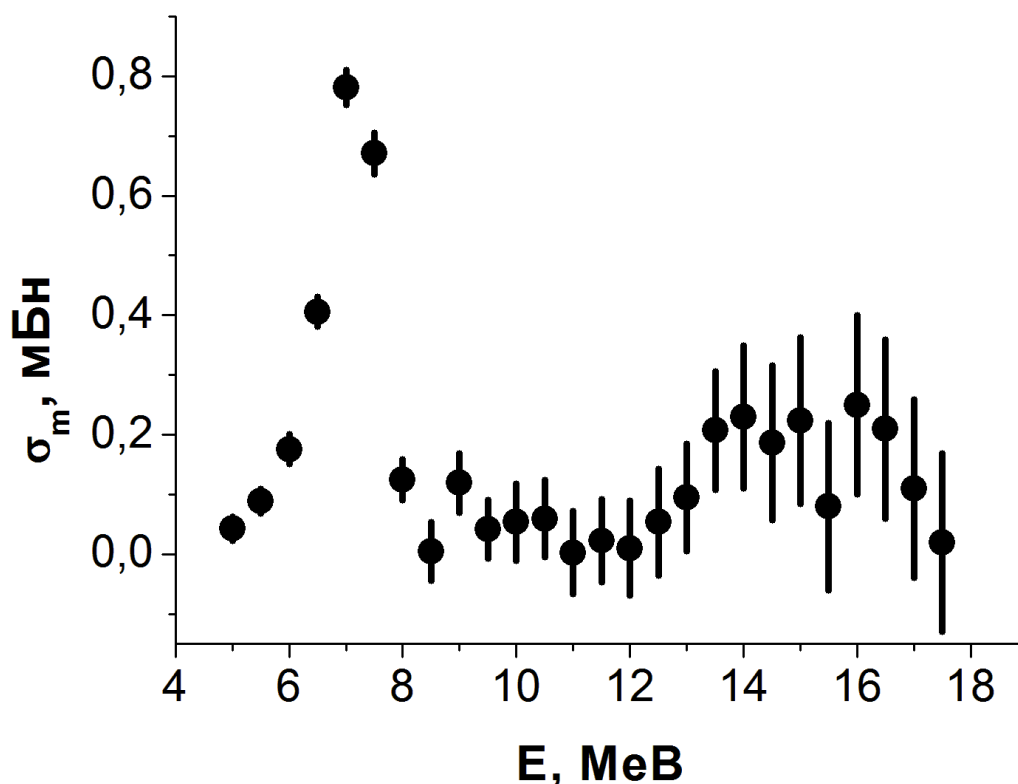


Рис. 1: Експериментальний переріз реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$.

При розрахунках повного перерізу реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$ використовувалась наступна схема: на ядро-зразок з параметрами (Z_i, N_i) і спин-парністю (J_i, π_i) падає гамма-квант з енергією E_γ ($E_\gamma = E_c$) і створюється ядро (компаунд) із значенням спіну і парності (J_c, π_c) , а далі розраховується повний переріз фотопоглинання σ_{tot} , для опису якого використовуються одержані експериментальні параметри гігантських резонансів [15]. Вважається, що розпад збудженого ядра відбувається за рахунок двох каналів: нерівноважного процесу [16] і статистичного механізму Хаузера-Фешбаха [17]. Густина рівнів розраховувалась за допомогою моделі Фермі-газу зі зміщенням по енергії [18]. Спектр низькорозташованих рівнів враховувався. До енергії збудження 3 МеВ бралися рівні з бази даних RIPL-3. Для розрахунку конкуренції радіаційного каналу і каналів з вильотом інших частинок обчис-

лювались передаточні коефіцієнти, які входять в модель Хаузера-Фешбаха. Радіаційні силові функції, що входять в передаточні коефіцієнти бралися для Е1-переходів у виді узагальненого лоренціана запропонованого Копецким і Углем [19], для переходів інших мультиполів використовувалась формула Акселя-Брінка [20, 21]. Результати розрахунку повного перерізу розсіювання гамма-квантів σ_{scat}^{tot} в реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$ приведені на рис. 2. Як видно з рис. 2 характер енергетичної залежності перерізу σ_{scat}^{tot} реакції (γ, γ') в загальних рисах повторює одержаний нами експериментальний переріз реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$ (рис. 1). В повному перерізі розсіювання також спостерігаються два максимума – при енергіях 7,0 МеВ і 15,0 МеВ, але при цьому σ_{scat}^{tot} складає в максимумі 10,3 мб при $E = 7,0$ МеВ і 1,5 мб при $E = 15,0$ МеВ, що суттєво більше ніж в реакції $(\gamma, \gamma')^m$.

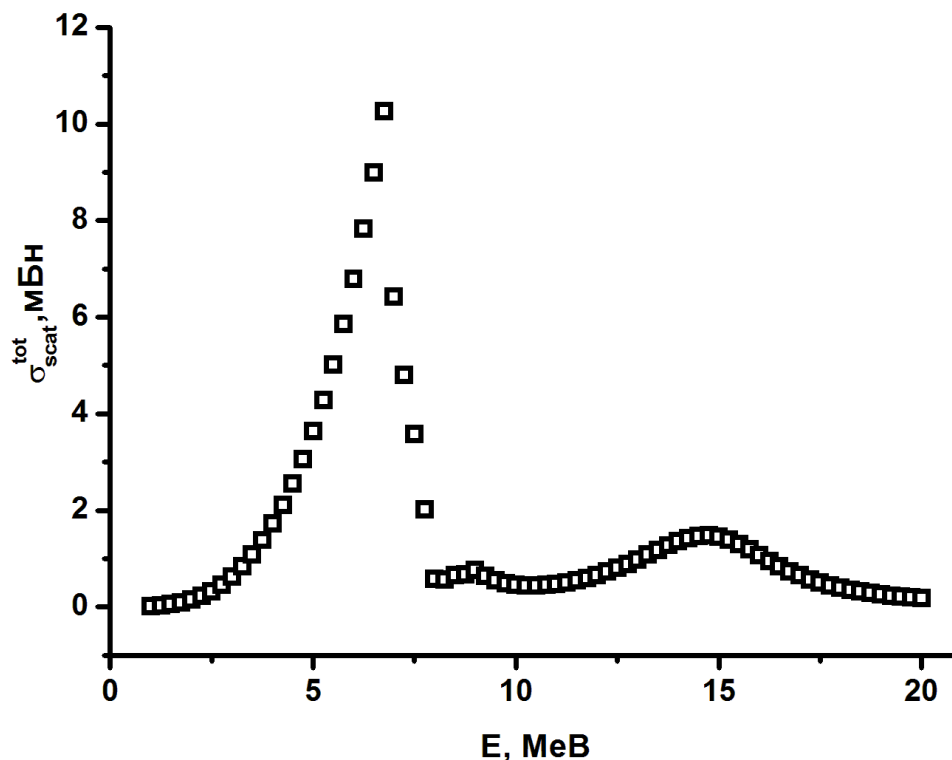


Рис. 2: Повний переріз розсіювання гамма-квантів σ_{scat}^{tot} в реакції (γ, γ') .

Одержаний нами експериментальний переріз реакції $(\gamma, \gamma')^m$ дозволяє одержати для каналу розсіювання оцінку експериментального ізомерного відношення $r = \sigma_m / \sigma_{scat}^{tot}$ і порівняти з розрахунками. Апроксимація перерізу повного поглинання гамма-квантів ядрами σ_{tot} лоренцовою кривою задовільно описує експериментальні дані на віддалі однієї-двох ширин від максимуму гігантського E1-резонансу, тому є можливість, використовуючи літературні експериментальні дані по повним перерізам фотопоглинання (повним фотонейтронним перерізам) для ядер барію-138 [22], оцінити експериментальне ізомерне відношення розсіювання $r = \sigma_m / \sigma_{scat}^{tot}$ в області порогу реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$, оскільки в області порогу реакції (γ, n) і нижче повний переріз фотопоглинання вичерпується повним перерізом розсіювання σ_{scat}^{tot} . Із-за відсутності експериментального перерізу σ_{tot} для барію-137 в якості його значень бралися повні перерізи для ^{138}Ba . Так як ядра ^{137}Ba і ^{138}Ba є сусідніми і не лежать в перехідній області, то завдяки слабкій залежності параметрів гі-

гантського резонансу від маси ядер, таке використання являється допустимим. Одержане нами ізомерне відношення $r = \sigma_m / \sigma_{scat}^{tot}$ для каналу розсіювання для енергії фотонів $E = 7,0$ MeV складає $0,085 \pm 0,02$ і приведені точкою на рис. 3. На цьому ж рисунку приведені результати розрахунку ізомерних відношень по статистичній теорії Фермі-газу в дусі роботи [23]. При цьому робились наступні допущення: поглинається дипольний гамма-квант, ядро переходить в стан із спіном (J_c, π_c) . Збудження утвореного дочірнього ядра знімається каскадом гамма-переходів, останній з яких (вирішальний) заселяє основний або ізомерний стан.

При розрахунках спінова частина густини ядерних рівнів бралася із формули Бете-Блоха [24]:

$$\rho(J) = (2J + 1) \cdot \exp \left[- \frac{J + 1/2}{2\sigma^2} \right],$$

де σ – параметр обмеження по спіну, який у відповідності з [24] обчислюється за формулою:

$$\sigma^2 = 0,0889 \sqrt{aU} \cdot A^{2/3},$$

тут a – параметр густини рівнів, A – масове число, U – ефективна енергія збудження. Середнє число гамма-переходів в каскаді обчислювалося за формулою для дипольного ви-

промінювання [25]:

$$N = \frac{1}{2} \sqrt{aU}.$$

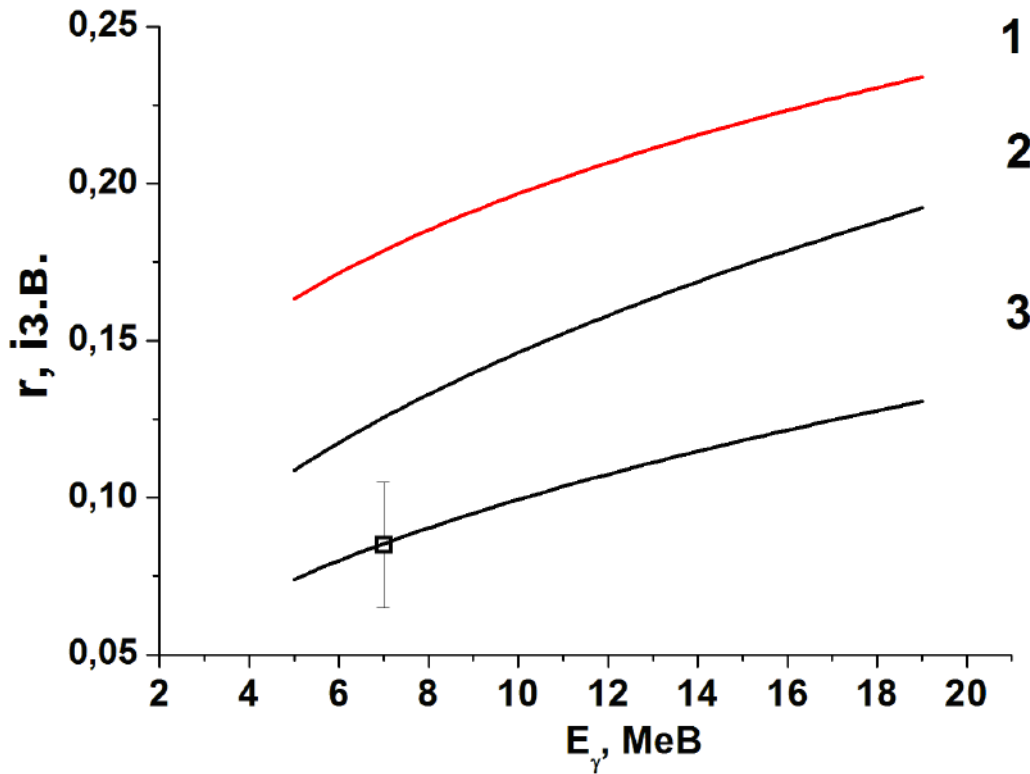


Рис. 3: Ізомерне відношення реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$.

Більш детально опис результатів для обчислення ізомерних відношень в реакції (γ, γ') приведено в роботі [26].

На рис. 3 крива 1 – це результат розрахунку залежності ізомерних відношень перерізів реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$ від енергії гамма-квантів при фіксації параметра обмежень спіну σ на рівні $\sigma^2 = 9$, крива 2 – на рівні $\sigma^2 = 6.25$. Треба відзначити, що зменшення параметру σ покращує узгодження з експериментом. Обидві криві демонструють схожу залежність r від енергії фотонів. Із рисунку видно, що розрахунки по статистичній моделі вказують на плавний ріст ізомерного відношення r з ростом енергії гамма-квантів, що зв'язано із збільшенням кількості переходів в гамма-каскаді, що заселяє ізомерний стан. Крива 3 на рис. 3 – це

віднормована на експериментальне ізомерне відношення при $E=7,0$ MeV крива 2. Така крива дозволяє достатньо надійно оцінити ізомерне відношення перерізів в реакції (γ, γ') при більш високих енергіях гамма-квантів (10 – 18 MeV), а відповідно, використовуючи теоретичний повний переріз розсіювання розрахувати теоретичний переріз збудження ізомерного стану реакції $(\gamma, \gamma')^m$ для ізоотопу ^{137}Ba . На рис. 4 суцільною лінією приведений результат розрахунку перерізу збудження ізомерного стану в реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$. Видно, що він задовільно узгоджується з експериментальними даними як в інтервалі 5 – 8 MeV так і в області 15 – 16 MeV, тобто в області максимуму гігантського дипольного резонансу.

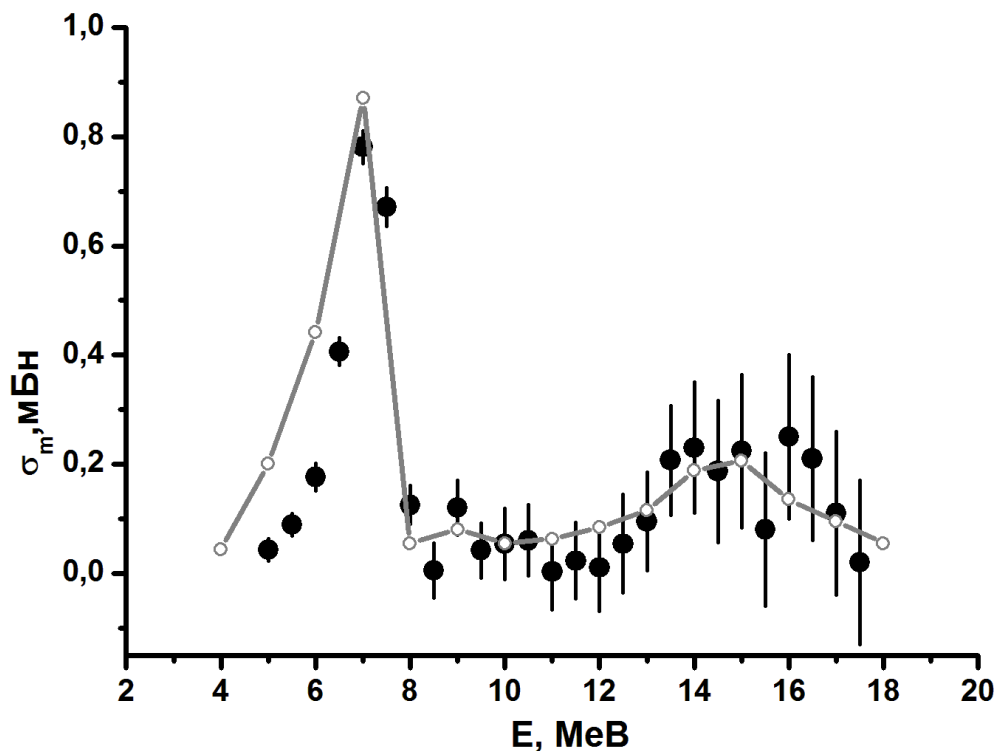


Рис. 4: Порівняння експериментального і теоретичного перерізів в реакції $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$.

Висновки

В результаті проведених досліджень одержана залежність перерізу збудження ізомерного стану $11/2^-$ ядра ^{137}Ba в реакції $(\gamma, \gamma')^m$. Експериментальне дослідження проводилося на гальмівному пучку мікротрону М-30 в області енергій 5 – 18 MeV. Перший максимум в перерізі співпадає з порогом реакції (γ, n) на ядрі ^{138}Ba . Він формується з одного боку загальним ростом перерізу фотопоглинання в області 5 – 7 MeV обумовлений гігантським дипольним резонансом із другого – спадом перерізу розсіювання вище 7 MeV, викликаний конкуренцією каналів непружного розсіювання гамма-квантів і (γ, n) реакції.

Другий максимум скоріш за все зв'язаний з загальним ростом перерізу фотопоглинання σ_{tot} в області максимуму гігантського E1-резонансу і відповідно з загальним ростом повного перерізу розсіювання гамма-квантів на ядрі ^{137}Ba в цій області енергій.

В досліджуваному інтервалі енергій проведено розрахунки перерізів розсіювання гамма-квантів на ізотопі ^{137}Ba по програмі TALYS-1.9, які доповнили обчислення ізомерних відношень в рамках статистичного підходу. Одержаний розрахунковий переріз реакції $(\gamma, \gamma')^m$ добре узгоджується з експериментальними даними. Таке узгодження скоріш за все свідчить про домінування статистичного механізму в досліджуваній реакції.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Гангрский Ю.П. Рассеяние γ -квантов ядрами / Ю.П. Гангрский, В.М. Мазур // ЭЧАЯ – 2002. – Т. 33, вып. 1. – С. 158-200.
- [2] Versteegen M. Low-energy modification of the γ -strength function of the odd-even nucleus ^{115}In / M. Versteegen, D. Denis-Petit, V. Méot, T. Bonnet, M. Comet, F. Gobet, F. Hannachi,

- M. Tarisien, P. Morel, M. Martini, S. Péru // *Phys. Rev. C.* – 2016. – V. 94. – 044325. – P. 1–12.
- [3] Dzhilavyan L.Z. Cross section for the reaction $^{115}\text{In}(\gamma, \gamma')^{115m}\text{In}$ in the region of the E1 giant resonance / L.Z. Dzhilavyan // *Phys. Atom. Nucl.* – 2015. – V. 78., Iss. 5 – P. 624–633.
- [4] Versteegen M. Effective photoexcitation cross-section of $^{115}\text{In}(\gamma, \gamma')^{115m}\text{In}$ from photoactivation data / M. Versteegen, D. Denis-Petit, V. Méot, T. Bonnet, M. Comet, F. Gobet, F. Hannachi, P. Morel, M. Martini, S. Péru, M. Tarisien, M-M. Aléonard // *EPJ Web of Conferences* – 2016. – V. 122. – 03001. – P. 1–12.
- [5] Firestone R.B. Table of Isotopes, 8th. Edition / R.B. Firestone. – New-York: J. Wiley and Sons, 1996. – 348 p.
- [6] Kapica S.P. The Microtron / S.P. Kapica, V.N. Melechin. – London: Harwood Academie, 1978. – 211 p.
- [7] Богданкевич О.В. Неупругое рассеяние фотонов на ядрах Rh^{103} / О.В. Богданкевич, Л.Е. Лазарева, А.М. Мойсеев // *ЖЭТФ* – 1960. – Т. 39 – С. 1224–1228.
- [8] Silva E. Inelastic Scattering of photons in ^{89}Y / E. Silva, J. Goldemberg // *Phys. Rev.* – 1958. – V. 110 – №5. – P. 1102–1103.
- [9] Meyer-Schizmeister L. Inelastic Nuclear Scattering of Photons by ^{137}Au / L. Meyer-Schizmeister, V.L. Telegdi // *Phys. Rev.* – 1956. – V. 104 – №1. – P. 186–192.
- [10] Flowers B.H. A thick-walled ionization chamber for measuring the intensity of X – Radiation of energy up to 25 Mev / B.H. Flowers, J.D. Lawson, E.B. Fossey // *Proc. Phys. Soc.* – 1952. – V. 65B. – P. 286–292.
- [11] Bogdankevich O. V. Methods in Bremsstrahlung Research / O. V. Bogdankevich, F.A. Nikolaev. – New-York: Academic Press, 1966. – 247 p.
- [12] Mazur V. M. Excitation of the $^{119}\text{Te}^m$, $^{121}\text{Te}^m$, $^{123}\text{Te}^m$, $^{127}\text{Te}^m$ and $^{129}\text{Te}^m$ isomers in (γ, n) reactions from 10 to 20 MeV / V.M. Mazur, D.M. Symochko, Z.M. Bigan, T.V. Poltorzhyska // *Phys. Rev. C* – 87. – 2013. – 044604. – P. 1–8.
- [13] Мазур В.М. Изучение сечений заселения изомеров ^{111m}Cd и ^{199m}Hg при неупругом рассеянии фотонов при энергиях 4–10 МэВ / З.М. Биган, Мазур В.М., И.В. Соколюк. – К. КИЯИ, 1988. – 15 с. – (Препринт / НАН Украины, Институт ядерных исследований; КИЯИ-88-13).
- [14] Koning A.J. TALYS: Comprehensive nuclear reaction modelling / A.J. Koning, S. Hilarie, M.C. Duijvestijn // *AIP Conference Proceedings* – V. 769 – P. 1154 – 2005.
- [15] Varlamov A.V. Atlas of Giant Dipole Resonances / A.V. Varlamov, V.V. Varlamov, D.S. Rudenko, M.E. Stepanov // *IAEA, INDS(NDS)* – 394, Vienna, Austria – 1999 – 350 p.
- [16] Gadiodi E. Pre-equilibrium Nuclear Reaction / E. Gadiodi, P.E. Hadgson. – Oxford: University Press – Oxford, 1992. – 150 p.
- [17] Hauser W. The inelastic scattering of neutrons / W. Hauser, H. Fesbach // *Phys. Rev.* – 1952. – V. 87. – P. 366–373.
- [18] Dilg W. Level density parameters for the Back-shifted fermi-gas model in the mass range $40 < A < 250$ / W. Dilg, W. Schatl, H. Vonach, M. Uhl // *Nucl. Phys. A.* – 1973. – V. 217. – P. 269 – 298.

- [19] Kopecky J. Test of gamma-ray strength functions in nuclear reaction model calculations / J. Kopecky, M. Uhl // Phys. Rev. C. – 1990. – V. 41. – P. 1941–1955.
- [20] Brink D.M. Individual particle and collective aspects of the nuclear photoeffect / D.M. Brink // Nucl. Phys. – 1957. – V. 4. – P. 215–220.
- [21] Axel P. Electric Dipole Ground-State Transition Width Strength Function and 7-MeV photon Interactions / P. Axel // Phys. Rev. – 1962. – V. 126. – P. 671–683.
- [22] Berman B.L. Photoneutron Cross Sections for Ba¹²⁸ and N¹⁴ / B.L. Berman // Phys. Rev. C. – 1970. – V. 2. – P. 2318–2323.
- [23] Арифов Л.Я. Относительная вероятность заселения изомеров в реакции радиационного захвата / Л.Я. Арифов, Б.С. Мазитов, В.Г. Уланов // Ядерная Физика – 1981 – Т. 34. – вып.4 – С. 1028–1043.
- [24] Малышев А.В. Плотность уровней и структура атомных ядер / А.В. Малышев. – Москва: Атомиздат, 1969. – 350 с.
- [25] Струтинский В.М. Спектры γ -лучей, возникших при захвате тепловых нейтронов тяжёлыми ядрами / В.М. Струтинский, М.В. Грошев, М.К. Акимов // ЖЭТФ – Т. 38 – №2 – 1960 – С. 598–611.
- [26] Биган З.М. Изомерные отношения в реакции (γ, γ') на тяжёлых деформированных ядрах ¹⁶⁷Er, ¹⁷⁹Hf, ¹⁸³W / З.М. Биган, М.В. Гошовский, В.М. Мазур, З. З. Торич. – К.КИЯИ, 1985. – 12 с. – (Препринт / НАН Украины, Институт ядерных исследований; КИЯИ-85-15).

Стаття надійшла до редакції 3.04.2019

В.М. Мазур, З.М. Биган, П.С. Деречкей, Д.М. Симочко

Институт электронной физики НАН Украины, 88000, г. Ужгород, ул. Университетская, 21, Украина,
e-mail: derecskei89@gmail.com

ВОЗБУЖДЕНИЕ ИЗОМЕРНОГО СОСТОЯНИЯ 11/2⁻ ЯДРА ¹³⁷Ba В РЕАКЦИИ $(\gamma, \gamma')^m$

Исполнено теоретическое и экспериментальное исследование сечения возбуждения изомерного состояния 11/2⁻ ядра ¹³⁷Ba в реакции $(\gamma, \gamma')^m$. Экспериментальное исследование проводилось на тормозном пучке гамма-квантов микротрона М-30 в области энергий 4–17 МэВ.

Ключевые слова: атомное ядро, ядерные реакции, сечение, гигантский дипольный резонанс, тормозной гамма-спектр, изомерное отношение.

V.M. Mazur, Z.M. Bigan, P.S. Derechkei, D.M. Symochko

Institute of electron physics of the NAS of Ukraine, 88000, 21 Universitetska str., Uzhhorod, Ukraine,
e-mail: derecskei89@gmail.com

INVESTIGATION OF THE $11/2^-$ ISOMERIC STATE EXCITATION OF THE ^{137}Ba NUCLEUS IN THE $(\gamma, \gamma')^m$ REACTION

Purpose. To determine the $(\gamma, \gamma')^m$ reaction cross section dependence on the gamma-quanta energy for the ^{137}Ba nucleus.

Methods. Activation analysis used for the measurement of the reaction output channels.

Results. This paper presents measurement results for the experimental determination of the $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$ reaction cross section in the region $E_{\gamma_{max}} = 5 - 18$ MeV for the maximum energies of the bremsstrahlung gamma-spectra. The work was performed on a beam of M-30 microtron electron accelerator Bremsstrahlung gamma rays. The energy dispersion of the accelerated electrons was $\pm(5-20)$ keV. The induction of the magnetic field of the accelerator and the corresponding energy of the accelerated electrons were determined by the method of nuclear magnetic resonance, and the measurement error did not exceed $\pm 0.1\%$. The experimental yield curve of the reaction $^{137}\text{Ba}(\gamma, \gamma')^{137m}\text{Ba}$ was measured in 0.5 MeV increments and was used to calculate the cross section $\sigma_m(E)$ of the reaction $(\gamma, \gamma')^m$. Calculations of $\sigma_m(E)$ were performed by the Penfold-Leiss method. The obtained experimental results were compared with theoretical calculations performed using the TALYS-1.9 software.

Conclusion. In the obtained cross-sections a peak can be observed with a maximum of 0.8 mb at 7.0 MeV, and a smaller peak with a maximum at 15 MeV. The observation, that the theoretical cross section closely follows the experimental data points to the domination of the statistical mechanism in the $(\gamma, \gamma')^m$ reaction.

Keywords: nuclear reaction, isomeric yield ratio, giant dipole resonance, Bremsstrahlung gamma-spectrum.

REFERENCES

- [1] Gangrsky, Yu.P., Mazur, V.M. (2002), «The scattering of γ -quanta by Nuclei and excitation isomer states» [«Rasseyanie γ -kvantov yadrami»], PEPAN [Fizika elementarnykh chastits i atomnogo yadra], V. 33, Iss. 1, pp. 158 – 200.
- [2] Versteegen, M., Denis-Petit, D., Méot, V., Bonnet, T., Comet, M., Gobet, F., Hannachi, F., Tarisien, M., Morel, P., Martini, M., Péru, S. (2016), «Low-energy modification of the γ -strength function of the odd-even nucleus ^{115}In », Phys. Rev. C., V. 94, 044325, pp. 1 – 12.
- [3] Dzhilavyan, L.Z. (2015), «Cross section for the reaction $^{115}\text{In}(\gamma, \gamma')^{115m}\text{In}$ in the region of the E1 giant resonance», Phys. Atom. Nucl., V. 78, pp. 624 – 633.
- [4] Versteegen, M., Denis-Petit, D., Méot, V., Bonnet, T., Comet, M., Gobet, F., Hannachi, F., Morel, P., Martini, M., Péru, S., Tarisien, M., Aléonard, M-M. (2016), «Effective photoexcitation cross-section of $^{115}\text{In}(\gamma, \gamma')^{115m}\text{In}$ from photoactivation data», EPJ Web of Conferences, V. 122, 03001, pp. 1 – 12.
- [5] Firestone, R.B. (1996), Table of Isotopes, 8th. Edition, J. Wiley and Sons, New York, 347 p.
- [6] Kapica, S.P. and Melechin, V.N. (1978), The Microtron, Harwood Academie, London, 211 p.

- [7] Bogdankevich, O.V., Lazareva, L.E., Moiseev, A.M. (1960), «Inelastic photon scattering on Rh^{103} nuclei» [«Neuprugoe rasseyanie fotonov na yadrakh Rh^{103} »], ZhETF, V. 39, pp. 1224 – 1228.
- [8] Silva, E., Goldemberg, J. (1958), «Inelastic Scattering of photons in ^{89}Y », Phys. Rev., V. 110, №5, pp. 1102 – 1103.
- [9] Meyer-Schizmeister, L., Telegdi, V.L., (1956), «Inelastic Nuclear Scattering of Photons by Au^{137} », Phys. Rev., V. 104, №1., pp. 186 – 192.
- [10] Flowers, B.H., Lawson, J.D., Fossey, E.B. (1952), «A thick-walled ionization chamber for measuring the intensity of X–Radiation of energy up to 25 MeV», Proc. Phys. Soc., V. 65B., pp. 286 – 292.
- [11] Bogdankevich, O.V., Nikolaev, F.A. (1966), Methods in Bremsstrahlung Research, Academic Press, New-York, 247 p.
- [12] Mazur, V.M., Symochko, D.M., Bigan, Z.M., Poltorzhytska, T.V. (2013), «Excitation of the $^{119}\text{Te}^m$, $^{121}\text{Te}^m$, $^{123}\text{Te}^m$, $^{127}\text{Te}^m$ and $^{129}\text{Te}^m$ isomers in (γ, n) reactions from 10 to 20 MeV», Phys. Rev. C 87., 044604, pp. 1 – 8.
- [13] Bigan, Z.M., Mazur, V.M., Sokolyuk, I.V. (1988), «Study of the cross sections populating the isomers ^{111m}Cd and ^{199m}Hg during the inelastic scattering of photons at energies 4-10 MeV» [«Izuchenie secheniy zaseleniya izomerov ^{111m}Cd i ^{199m}Hg pri neuprugom rasseyanii fotonov pri energiyakh 4-10 MeV»], Preprint KINR-88-13, Kyiv, 15 p.
- [14] Koning, A.J., Hilarie, S., Duijvestijn, M.C. (2005), «TALYS: Comprehensive nuclear reaction modelling», AIP Conference Proceedings, v. 769, p.1154.
- [15] Varlamov, A.V., Varlamov, V.V., Rudenko, D.S., Stepanov, M.E. (1999), Atlas of Giant Dipole Resonances, IAEA, INDS (NDS) – 394, Vienna, Austria, 311 p.
- [16] Gadiodi, E. and Hadgson, P.E. (1992), Pre-equilibrium Nuclear Reaction, Oxford University Press, Oxford, 150 p.
- [17] Hauser, W., Feshbach, H. (1952), «The inelastic scattering of neutrons», Phys. Rev., V. 87, pp. 366 – 373.
- [18] Dilg, W., Schatl, W., Vonach, H., Uhl, M. (1973), «Level density parameters for the Back-shifted fermi-gas model in the mass range $40 < A < 250$ », Nucl. Phys. A., V. 217., pp. 269-298.
- [19] Kopecky, J. and Uhl, M. (1990), «Test of gamma-ray strength functions in nuclear reaction model calculations», Phys. Rev. C., V. 41, pp. 1941 – 1955.
- [20] Brink, D.M. (1957), «Individual particle and collective aspects of the nuclear photoeffect», Nucl. Phys., V. 4, pp. 215 – 220.
- [21] Axel, P. (1962), «Electric Dipole Ground-State Transition Width Strength Function and 7-MeV Photon Interactions», Phys. Rev., V. 126, pp. 671 – 683.
- [22] Berman, B.L., Fultz, S.C., Caldwell, J.T. (1970), «Photoneutron Cross Sections for Ba^{138} and N^{14} », Phys. Rev. C., V. 2, pp. 2318 – 2323.
- [23] Arifov, L.Y., Mazitov, B. S., Ulanov, V. G. (1981), «Relative probability of populating isomers in the radiation capture reaction» [«Otnositelnaya veroyatnost zaseleniya izomerov v reaktsii radiatsionnoho zakhvata»], YaF, №4, pp. 1028 – 1043.

- [24] Malyshev, A.V. (1969), Level density and structure of atomic nuclei [Plotnost urovney i struktura atomnikh yader], Atomizdat, Moscow, 350 p.
- [25] Strutinskiy, V.M., Groshev, M.V., Akimov, M.K. (1960), «Spectra of γ -beams, created in the capture of thermal neutrons by heavy nuclei» [«Spektry γ -luchey, vznikshikh pri zakhvate teplovykh neytronov tyazhelymi yadrami»], ZhETF, V. 38, №2, pp. 598 – 611.
- [26] Bigan, Z.M., Goshovskiy, M.V. Mazur, V.M., Tarics, Z. Z. (1985), «Isomeric ratios in the (γ, γ') reaction in the heavy deformed nuclei ^{167}Er , ^{179}Hf , ^{183}W » [«Izomernye otnosheniya v reaktsii (γ, γ') na tyazhelykh deformirovannykh yadrakh ^{167}Er , ^{179}Hf , ^{183}W »], Preprint KINR-85-15, Kiyv, 12 p.

©Ужгородський національний університет

УДК 539.1.09, 658.562: 621
PACS 29.17.+w, 29.27-a
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.50-60

І.В. Пилипчинець, О.О. Парлаг, В.Т. Маслюк, О.І. Лендел, М.І. Романюк,
 І.Г. Мегела, О.М. Турховський

Інститут електронної фізики НАН України, 88017, м. Ужгород, вул. Університетська, 21, Україна,
 e-mail: igor.profi@gmail.com

ДВОШАРОВІ МІШЕНІ ДЛЯ ФОРМУВАННЯ ПУЧКІВ ВИСОКОЕНЕРГЕТИЧНИХ ФОТОНІВ НА ЕЛЕКТРОННОМУ ПРИСКОРЮВАЧІ – МІКРОТРОНІ М-30

Проведені експериментальні дослідження поглинання електронів в одно-(С ($7 \div 46$ мм), Al ($8 \div 48$ мм), Ta ($0.1 \div 1$ мм)) та двошарових (Ta (1 мм) + С ($7 \div 46$ мм)) і Ta (1 мм) + Al ($8 \div 40$ мм)) мішенях на електронному прискорювачі – мікротроні М-30 для області енергій електронів $6.5 \div 17.75$ МеВ. Додатково, проведені дослідження поглинання високоенергетичних фотонів одношаровими мішенями (С (20 мм), Al (20 мм)) з використанням активаційних детекторів. Встановлені оптимальні параметри двошарових мішеней (Ta + С і Ta + Al) для формування «чистих» пучків гальмівного випромінювання у зазначеній області енергій.

Ключові слова: мікротрон, гальмівне випромінювання, залишкові електрони, поглинання електронів, двошарові мішені.

Вступ

Гальмівне випромінювання, отримане на електронних (лінійних) прискорювачах чи мікротронах, широко застосовується для експериментальних досліджень характеристик фотоядерних реакцій (область енергій гігантського дипольного резонансу), а також для вирішення прикладних задач [1–4].

Для отримання пучків гальмівного випромінювання на електронних прискорювачах використовують конвертери (гальмівні мішені) з тугоплавких металів (W, Ta, Pt) з великим зарядовим числом Z [4–8]. Вихід гальмівного випромінювання залежить від енергії електронів, струму електронного пучка, матеріалу мішені та його ефективної товщини. Оптимальна товщина конвертера (коли вихід гальмівного випромінювання є максимальним) становить $0,3 \div 0,5$ величини пробігу електронів в речовині, з якої він виготовлений [6–8]. Саме цим обумовлена наявність залишкових електронів у пучках

гальмівного випромінювання [9].

При взаємодії прискорених електронів з гальмівною мішенню, конструкційними матеріалами прискорювача і повітрям відбувається їх розсіювання і перерозподіл енергетичного спектру. Крім того, залишкові електрони, потрапляючи на досліджувані мішені, додатково ініціюють в них електроядерні та фотоядерні реакції [10], які є джерелом систематичних похибок експерименту та призводять до руйнування самих джерел.

У зв'язку з цим, виникає необхідність очистки пучків гальмівного випромінювання від залишкових електронів. Для зменшення числа електронів, які попадають на досліджувану мішень, без значного ослаблення інтенсивності гальмівного випромінювання, використовують матеріали з малим зарядовим числом Z (С, Al) [1, 2, 11, 12]. Тому при дослідженні характеристик фотоядерних реакцій на електронних прискорювачах виникає необхідність формування «чистих» пучків гальмівного випромінювання

в місці розташування досліджуваних мішеней по їх площині. Реалізація вказаної задачі досягається шляхом застосування комбінованих (двошарових) мішеней, які використовуються для генерації пучка гальмівного випромінювання та його очистки від залишкових електронів.

Метою представленої роботи є встановлення оптимальних параметрів двошарових мішеней для формування «чистих» пучків високоенергетичних фотонів на електронному прискорювачі — мікротроні М-30 для області енергій $6.5 \div 17.75$ MeV.

Експериментальні дослідження поглинання електронів одно- та двошаровими мішенями

Для реалізації вказаної задачі були проведені експериментальні дослідження поглинання прискорених електронів для матеріалів, з яких виготовлялися гальмівна мішень — тантал (Ta) і фільтри для очистки пучка від залишкових електронів — вуглець (C, $\rho = 1.73$ г/см³), алюміній (Al), та їх комбінацій (Ta + C і Ta + Al). У якості гальмівної мішені, завдяки його ядерно-фізичним характеристикам, використовувався тантал [13]. Вибір вуглецю (реакторного графіту) [14,15] й алюмінію, як матеріалів фільтрів для поглинання залишкових електронів, обумовлений їх високими енергетичними порогоми і малими перерізами взаємодії з гальмівним випромінюванням по каналах фотоядерних реакцій [10], а також їх високою радіаційною стійкістю та низькою вартістю. Крім того, ці матеріали поглинають низькоенергетичні фотони без суттєвої деформації високоенергетичної частини спектру гальмівного випромінювання [1,11,12] та можуть слугувати отриманню однорідних полів випромінювання [10].

Характеристики мішеней

Експериментально коефіцієнт поглинання електронів в досліджуваних мішенях визначався методом пропускання на мікротроні М-30 при енергіях електронів 6.4; 9.75; 12.7; 14.9; 17.75 MeV. Вимірювання виходів прискорених та залишкових електронів, що про-

йшли шар поглинаючого матеріалу, проводилися за допомогою монітора вторинної емісії (прохідною камерою) та циліндром Фарадея, відповідно. Сигнал монітора вторинної емісії калібрувався по сигналу циліндра Фарадея в процесі вимірів. При проведенні експериментальних досліджень використовувалися диски металічного алюмінію (діаметр — 39 мм, товщина — $8 \div 48$ мм,) і реакторного графіту (діаметр — 39 мм, товщина — $7 \div 46$ мм), та квадратні танталові пластини (ребро — 30 мм, товщина — $0.1 \div 1$ мм). У випадку двошарових мішеней використовувалася комбінація танталу (товщина — 1 мм) та алюмінію (товщина — $8 \div 40$ мм) або вуглецю (товщина — $7 \div 39$ мм). За результатами експериментальних досліджень та моделювання за допомогою сучасних обчислювальних програм [6–8] було визначено, що для формування пучків гальмівного випромінювання для області енергій $6.5 \div 17.75$ MeV оптимальна товщина Ta становить — 1 мм.

Методика експерименту

Експериментально коефіцієнт поглинання електронів в досліджуваних мішенях визначався методом пропускання на мікротроні М-30 при енергіях електронів 6.4; 9.75; 12.7; 14.9; 17.75 MeV. Вимірювання виходів прискорених та залишкових електронів, що пройшли шар поглинаючого матеріалу, проводилися за допомогою монітора вторинної емісії (прохідною камерою) та циліндром Фарадея, відповідно. Сигнал монітора вторинної емісії калібрувався по сигналу циліндра Фарадея в процесі вимірів.

Коефіцієнти пропускання (T_e) та поглинання (A_e) визначалися за формулами:

$$T_e = I_{CF}/I_{MSE}, \quad (1)$$

$$A_e = (1 - T_e) \cdot 100\%, \quad (2)$$

де I_{MSE} і I_{CF} — сигнали від монітора вторинної емісії та циліндра Фарадея, відповідно.

На рис. 1 представлено схему вимірів коефіцієнта пропускання електронів одношаровими та двошаровими мішенями на мікротроні М-30, де 1 — мікротрон М-30, 2 — монітор вторинної емісії, 3 — вихідне вікно

вузла виводу, 4 – місце встановлення досліджуваних мішеней, 5 – циліндр Фарадея, 6 – вхідне вікно циліндра Фарадея, 7 і 8 – вимірювальні опори монітора вторинної емісії та циліндра Фарадея, 9,10 – аналогово-цифрові перетворювачі сигналу від монітора вторинної емісії та циліндра Фарадея, 11 – адаптер інтерфейсів, 12 – персональний комп'ютер (віртуальний пульт). На рис. 2 приведено фотографію експериментальної установки.

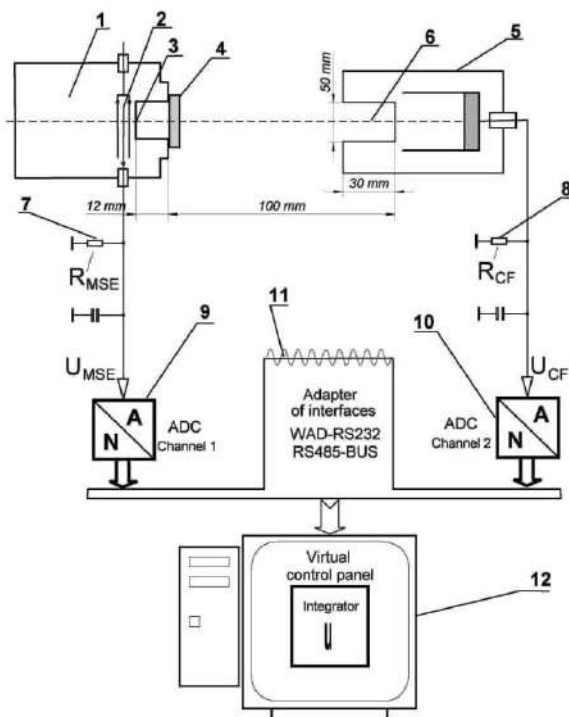


Рис. 1: Схема експериментальних досліджень пропускання (поглинання) електронів одно та двошаровими мішенями на мікротроні М-30 гальмівної мішені з танталу товщиною 1 мм.

Нестабільність енергії електронів в процесі проведення експерименту не перевищувала 0,04 MeV. Ефективність виводу електронів становила – 90÷95%.

Дослідження проводилися в площині, перпендикулярній до вісі пучка електронів на відстані 112 мм від вихідного вікна вузла виводу прискорених електронів.

Одно- та двошарові мішені встановлювалися впритул до вузла виводу на відстані 12 мм від вихідного титанового вікна (товщиною – 25 мкм) прискорювача. При проходженні через титанове вікно електрони гублять до 30 keV від початкової енергії. Розміри електронного пучка на виході вихідно-

го вікна прискорювача становили $10 \div 12$ мм по горизонталі та $3 \div 4$ мм по вертикалі.

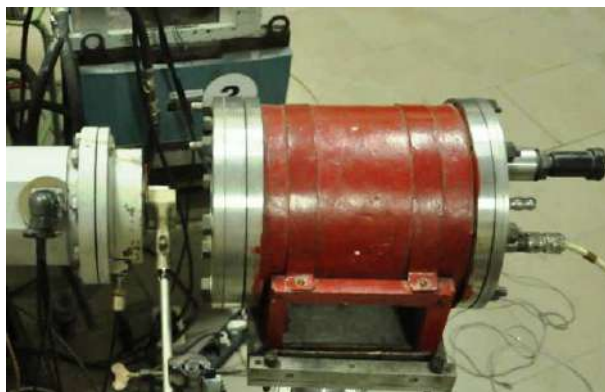


Рис. 2: Фотографія експериментальної установки дослідження пропускання (поглинання) електронів на мікротроні М-30.

Результати досліджень

Коефіцієнти пропускання електронів визначалися згідно формули (1). Для кожної окремої мішені проводилися 3 серії експериментальних вимірів при фіксованих значеннях енергії електронів. Середня статистична похибка для кожної окремої серії вимірів не перевищувала 5%. Значення залежності відносних коефіцієнтів пропускання електронів одно- та двошаровими мішенями від енергії електронів при фіксованих значеннях їх товщини представлені на рис. 3.

Коефіцієнти поглинання електронів визначалися з формули (2).

Експериментально встановлено, що одношарові мішені виготовлені з вуглецю, товщини яких становлять 20 і 39 мм, забезпечують поглинання $> 98\%$ електронів з енергіями 6.4 та 12.7 MeV відповідно, а виготовлені з Al, товщини яких становлять 12; 20; 32 і 40 мм, забезпечують таке ж поглинання електронів з енергіями 6.4; 9.75; 14.9 та 17.75 MeV відповідно. Отримані експериментальні дані корелюють з результатами моделювання за пакетами програм «GEANT» [11, 16] для енергій електронів > 10 MeV та «MNCP» [13] для області енергії електронів $5 \div 10$ MeV. Крім того, значення товщини поглинання електронів для C та Al добре узгоджуються зі значеннями «практичного» [13] пробігу електронів бази даних «ESTAR» [9] для зазначеної області

енергій. Двошарові мішені, які склалися з Ta (1 мм) і C (20 і 39 мм) забезпечують поглинання $> 98\%$ електронів з енергіями 9.75 та 17.75 MeV відповідно, а з Ta (1 мм) і Al

(12; 20; та 32 мм) забезпечують таке ж поглинання електронів з енергіями 9.75, 14.9 та 17.75 MeV відповідно.

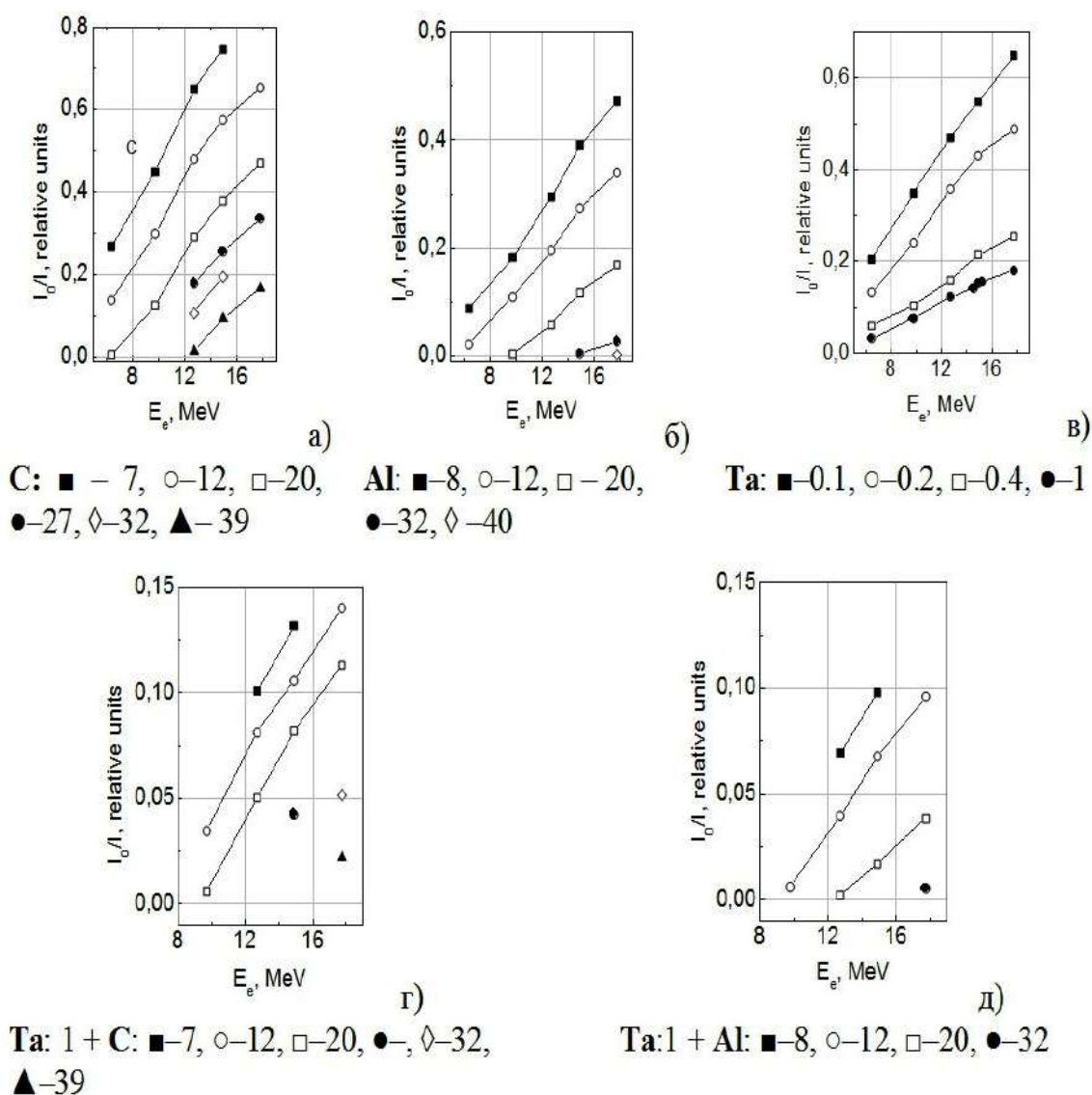


Рис. 3: Відносні коефіцієнти пропускання електронів в одно- та двошарових мішенях (числа – відстань у мм).

Експериментальні дослідження поглинання високоенергетичних фотонів одношаровими мішенями

Для визначення вмісту (густини потоку до одиниці площі) високоенергетичних фотонів у пучках гальмівного випромінювання, отриманих на електронних прискорювачах, використовуються активаційні детектори [17–19]. Їх застосування дозволяє визначати вміст саме тих «корисних» фотонів

у спектрі гальмівного випромінювання, які ініціюють фотоядерні реакції (тобто, коли енергія фотонів більше енергії порогу фотоядерних реакцій). Тому для оцінки поглинання гальмівного випромінювання одношаровими мішенями, виготовленими з алюмінію і реакторного графіту (які мали однакові геометричні розміри: діаметр – 39 мм, товщина – 20 мм), були використані активаційні детектори, що містили ізомери ^{197}Au і ^{55}Mn . Їх застосування дозволяло визначати

інтегральний вміст високоенергетичних фотонів, енергія (E_{ph}) яких охоплювала енергетичний інтервал від порогу (γ, n)-реакцій (для вказаних ізотопів – 8.01 і 10.23 MeV, відповідно) до максимальної енергій фотонів у спектрі пучка гальмівного випромінювання. Коефіцієнти пропускання гальмівного випромінювання одношаровими мішенями (C і Al) визначалися з відношення інтенсивності гамма-випромінювання від продуктів активації детекторів (^{55}Mn : $E_\gamma = 834.8$ кеВ, $I_\gamma = 99.98\%$ та ^{196}Au : $E_\gamma = 355.7$ кеВ, $I_\gamma = 87\%$ [20]), опромінених з мішенями та без них. Дослідження проводилися у точці площини, для якої визначалися коефіцієнти пропускання електронів одно та двошаровими мішенями (тобто у точці розташування центру площини вхідного вікна циліндра Фарадея).

Експериментальні дослідження проводилися при максимальній енергії гальмівного випромінювання 17.5 MeV. Активаційні детектори встановлювалися вздовж вісі пучка у площині, перпендикулярній до неї на відстані 100 мм від танталового конвертера (1 мм). Час опромінення детекторів при наявності та відсутності фільтрів становив – 15 хв. для ^{197}Au і 30 хв. для ^{55}Mn . Виміри гамма-випромінювання від утворених радіонуклідів ^{54}Mn і ^{196}Au проводилися на спектрометричному комплексі «Ortec» [20, 21] на протязі 200 годин. Час вимірів активаційних детекторів становив 25 хв. Для кожного окремого детектора проводилося не менше 8 вимірів. Статистична похибка спектрометричних вимірів не перевищувала 3 %. На рис. 4 приведені залежності відносної інтенсивності гамма-випромінювання утворених радіонуклідів: ^{54}Mn – а.) та ^{196}Au – б.) від часу їх охолодження. Експериментальні значення гамма-інтенсивності активаційних детекторів, опромінених без одношарових мішеней, позначені як ●, з мішенями як ▲ (C) і ■ (Al). Приведені значення інтенсивності були нормовані на дозу опромінення, площу активаційних детекторів та число ядер ізотопів ^{197}Au і ^{55}Mn , які містилися у детекторах. Результати теоретичних розрахунків при заданих умовах проведених експериментальних досліджень представлені суцільними лініями.

Експериментальні результати узгоджуються з розрахунками у межах 3 %.

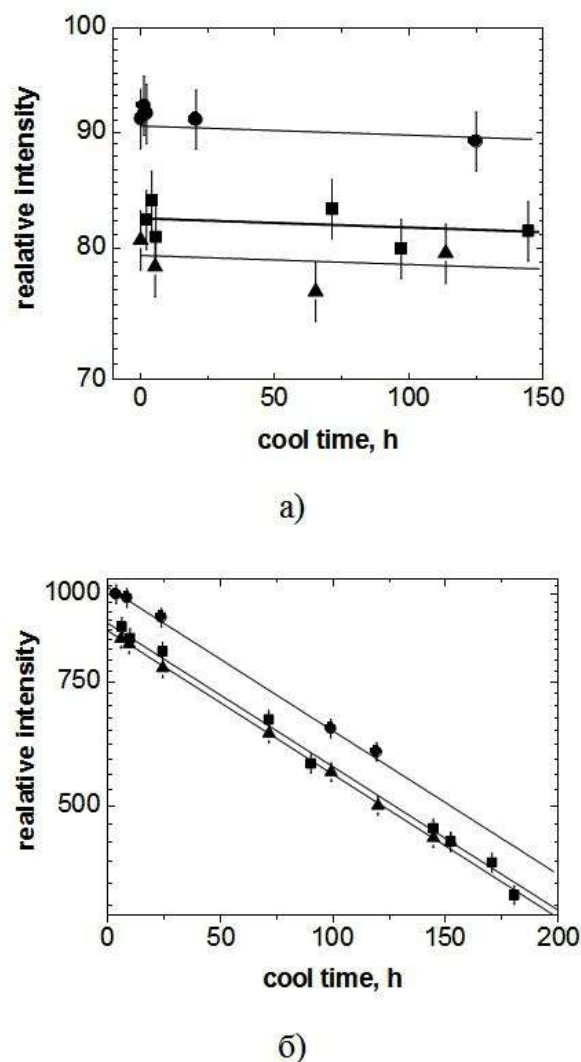


Рис. 4: Залежність відносної інтенсивності гамма-випромінювання утворених радіонуклідів від часу їх охолодження: а.) ^{54}Mn , б.) ^{196}Au .

Значення коефіцієнтів пропускання гальмівного випромінювання одношаровими мішенями, виготовленими з C та Al становили – 0.87 ± 0.09 і 0.89 ± 0.09 ($8.01 < E_{ph} < 17.50$ MeV) та 0.88 ± 0.09 і 0.91 ± 0.09 ($10.23 < E_{ph} < 17.50$ MeV), відповідно. Сумарна похибка вимірів не перевищувала 10%. Основний внесок у похибку давала невизначеність кількості ядер ізотопів – елементів, які входили до складу активаційних детекторів і складав – 7%.

Коефіцієнти поглинання високоенергетичних фотонів одношаровими мішенями визначалися аналогічно електронам, за формулою (2). Експериментально встановлено,

що одношарові мішені, виготовлені з С та Al (товщина – 20 мм) поглинають менше $9 \div 13$ % високоенергетичних фотонів. Отримані експериментальні дані корелюють з результатами моделювання поглинання фотонів з енергією > 10 MeV, одержаними з використанням пакету програм «GEANT» [11]. В проведених розрахунках поглинання становить – $8 \div 12$ % для шарів С та Al товщиною – 20 мм. При товщині мішені з С (– 39 мм) й Al (– 40 мм) ослаблення пучка гальмівного випромінювання для енергій більше 10 MeV буде становити – 17 % та – 23 % відповідно [11].

Висновки

Виходячи з результатів експериментальних досліджень, встановлено оптимальні параметри (товщини) двошарових мішеней (Та (1мм) + С та Та (1 мм) + Al) для формування «чистих» фотонних пучків на електронному

прискорювачі – мікротроні М-30 для області енергій $6.5 \div 17.75$ MeV. При використанні двошарових мішеней (Та (1 мм) + С (20 мм)) і (Та (1 мм) + Al (20 мм)) для формування пучків високоенергетичних фотонів поглинається 89 % і 96 % залишкових електронів та $9 \div 13$ % фотонів. При використанні двошарових мішеней (Та (1 мм) + С (39 мм)) і (Та (1 мм) + Al (32 мм)) – поглинається 98 % і 99 % залишкових електронів та 17 % і 19 % фотонів з енергією більше 10 MeV [11].

Використання двошарових мішеней дозволяє здійснювати процедури формування пучків високоенергетичних фотонів з параметрами, необхідними для проведення конкретних експериментальних досліджень на електронних прискорювачах, що підвищить точність та надійність отримуваних результатів.

Автори висловлюють подяку Куштау І.М. за технічне забезпечення експериментальних досліджень.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Starovoitova V. High intensity photon sources for activation analysis / V. Starovoitova, C. Segebade // J. Radioanal. Nucl. Chem. – 2016. – V. 310, Iss. 1. – P. 13–26.
- [2] Shahzad A. Design and development of the 6 – 18 MeV electron beam system for medical and other applications / A. Shahzad, A.B. Phatangare, V.D. Bharud, M.S. Bhadane, C.D. Tahakik, B.J. Patil, S.S. Dahiwal, S.T. Chavan, S.N. Pethe, S.D. Dhole, V.N. Bhoraska // Radiation effects & Defects in solids — 2017. — V. 172, Is. 11–12. — P. 931–951.
- [3] Versteegen M. Low-energy modification of the γ - strength function of the odd-even nucleus ^{115}In / M. Versteegen, D. Denis-Petit, V. Meot, T. Bonnet, M. Comet, F. Gobet, F. Hannachi, M. Tarisien, P. Morel, M. Martini, S. Peru // Phys. Rev. C – 2016. – V. 94. 044325.– P. 13.
- [4] Ko J. Characteristic analysis of a photon converter in a medical linac using GEANT4 / J. Ko, B.Y. Kim, Y.S. Kim // Vibroengineering Procedia – 2017. – V. 14. – P. 256–259.
- [5] Dixon D.A. Validation of the MCNP6 electron-photon transport algorithm: multiple-scattering of 13 - and 20 - MeV electrons in thin foils / A.D. Dixon, H.G. Hughes // EPJ Web of Conferences – 2017. – V. 153. 06021.– P. 6.
- [6] Kovalev V.P. Dependence of bremsstrahlung yield on target thickness and atomic number for 12 – 22 MeV electrons / V.P. Kovalev, V.P. Kharin, V.V. Gordeev, M.S Borisov // At Energy – 1971. – V. 31, Is. 3. – P. 1028–1031.
- [7] Kim Y.S. Estimation of photoneutron yield in linear accelerator with different collimation systems by Geant4 and MCNPX simulation codes / Y.S. Kim, Z. Khazaei, J. Ko, H. Afarideh, M. Ghergherehchi // Phys. Med. Biol. — 2016. — V. 61. — P. 2762–2779.

- [8] Hai-Bo Xu Monte Carlo simulation for bremsstrahlung and photoneutron yields in high-energy x-ray radiography / Xu Hai-Bo, P. Xian-Ke, C. Chao-Bin // Chin. Phys. B – 2010. – V. 19. 062901. – P. 1–8.
- [9] Electron and Photon attenuation [Електронний ресурс] // Режим доступу: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ESTAR.html>.
- [10] Varlamov A.V. Atlas of giant dipole resonance parameters and graphs of photonuclear reaction cross sections / A.V. Varlamov, V.V. Varlamov, D.S. Rudenko, M.E. Stepanov // INDC(NDS)-399, Int. Atomic Energy Agency, Int. Nuclear Data Committee. – 1999. – P. 321.
- [11] Ishkhanov B.S. Bremsstrahlung target for studying photonuclear reactions in the giant dipole resonance energy region / B.S. Ishkhanov, S.Yu. Troschiev // Moscow University Physics Bulletin – 2010. – V. 65, No. 1. – P. 39–42.
- [12] Gil Y.M. Monte Carlo simulation study of bremsstrahlung produced by 9 MeV electron linear accelerator / Y.M. Gil, Y.S. Lee, M.H. Cho, W. Namkung // KPS Conference Posters in Physics. Sungkyunkwan University. – April 23-24, 2004. – P. 8.
- [13] Sujoy C., Bandyopadhyay T., Roy A. Study of the variation of photo-neutron spectrum with various moderators generated using electron linac / C. Sujoy, T. Bandyopadhyay, A. Roy // Proceedings of the seventh DAE-BRNS Indian particle accelerator conference: book of abstracts. Mumbai (India). – 21-24 Dec 2015. – P. 3.
- [14] Virgil'ev Yu.S. Reactor Graphite / Yu.S. Virgil'ev, I.P. Kalyagina // Inorganic Materials – 2003. – V. 39 (1). – P. S46–S58.
- [15] Virgiliev Yu.S. Reactor graphite: development, production and properties / Yu.S. Virgiliev, A.N. Seleznev, A.A. Sviridov, I.P. Kalyagina // Russian Chemical Journal – 2006. – T. 50, No 1.– P. 4–12.
- [16] Bakalyarov A.M. Optimization of the extraction facilities of an electron accelerator - bremsstrahlung source for the pulsed photonuclear method / A.M. Bakalyarov, M.D. Karetnikov, V.I. Lebedev, G.V. Yakovlev // Atomic Energy – 2009. – V. 106, No. 3. – P. 206–212.
- [17] Парлаг О.О. Визначення вмісту фотонейтронів у гальмівному випромінюванні мікротрона М-30 активаційними детекторами / О.О. Парлаг, О.І. Лендел, В.М. Головей, В.Т. Маслюк, Т.Й. Маринець, М.М. Биров // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика – 2010. – Т. 28. – С. 99–106.
- [18] Thiep T.D. Determination of the total bremsstrahlung photon flux from electron accelerators by simultaneous activation of two monitors / T.D.Thiep, T.T. An, N.T. Khai, N.T. Vinh, P.V. Cuong, Iu.P. Gangrski, A.G. Belov, O.D. Maslo // Phys. Part. Nuclei Lett. – 2012. – V. 9. – P. 648–655.
- [19] Skakun Ye. Reaction rates of the $^{113}\text{In}(\gamma, n)^{112m}\text{In}$ and $^{115}\text{In}(\gamma, n)^{114m}\text{In}$ / Ye. Skakun, I. Semisalov, V. Kasilov, V. Popov, S. Kochetov, V. Maslyuk, V. Mazur, O. Parlag, I. Gajnish// J. Phys.: Conf. Ser. – 2016. – V. 665. 012040 – P. 1–4.
- [20] Decay Radiation database version of 1/3/2018 [Електронний ресурс] // Режим доступу: <https://www.nndc.bnl.gov/nudat2/indxdec.jspl>.

- [21] Лендєл О.І. Напівемпіричне описання абсолютної ефективності Ge(Li)-та HPGe-детекторів для фотоподільних експериментів / О.І. Лендєл, О.О. Парлаг, В.Т. Маслюк // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика. 2009. — Т. 25. — С. 95–99.
- [22] Pylypchynets I. Empirical formula for the HPGe-detector efficiency dependence on energy and distance / I. Pylypchynets, A. Lengyel, O. Parlag, V. Maslyuk, I. Potoki// J Radioanal Nucl Chem – 2019. — V. 319. — P. 1315–1319.

Стаття надійшла до редакції 17.05.2019

И.В. Пилипчинец, О.А. Парлаг, В.Т. Маслюк, А.И. Лендъел, Н.И. Романюк, И.Г. Мегела, А.Н. Турховский

Институт электронной физики НАН Украины, 88017, г. Ужгород, ул. Университетская, 21, Украина, e-mail: igor.profi@gmail.com

ДВУХСЛОЙНЫЕ МИШЕНИ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ПУЧКОВ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ФОТОНОВ НА ЭЛЕКТРОННОМ УСКОРИТЕЛЕ – МИКРОТРОНЕ М-30

Проведены экспериментальные исследования поглощения электронов в однослойных (С (7 ÷ 46 мм), Al (8 ÷ 48 мм), Ta (0.1 ÷ 1 мм)) и в двухслойных (Ta (1 мм) + С (7 ÷ 46 мм)) и Ta (1 мм) + Al (8 ÷ 40 мм)) мишенях на электронном ускорителе – микротроне М-30 для области энергий электронов 6.5 ÷ 17.75 МэВ. Дополнительно, проведены исследования поглощения высокоэнергетических фотонов однослойными мишенями (С (20 мм), Al (20 мм)) с использованием активационных детекторов. Установлены оптимальные параметры двухслойных мишеней (Ta + С и Ta + Al) для формирования «чистых» пучков тормозного излучения в указанной области энергий.

Ключевые слова: микротрон, тормозное излучение, остаточные электроны, поглощение электронов, двухслойные мишени.

I.V. Pylypchynets, O.O. Parlag, V.T. Masluyk, A.I. Lengyel, M.I. Romanyuk,
I.G. Megela, O.M. Tyrchovsky

Institute of Electron Physics, Nat. Acad. Sci. of Ukraine, 88017, Uzhhorod, 21 Universitetska str., Ukraine,
e-mail: igor.profi@gmail.com

DOUBLE-LAYER TARGETS FOR FORMING THE BEAMS OF THE HIGH-ENERGY PHOTONS ON THE ELECTRON ACCELERATOR OF M-30 MICROTRON

Purpose. The bremsstrahlung received at electron accelerators is widely used to study the characteristics of photonuclear reactions and to solve a wide spectrum (series) of applied problems. Basically the output of bremsstrahlung depends on the electron energy, the material of the target converter (Ta) and its effective thickness. The optimum thickness of the converter (when the output of the bremsstrahlung is at its maximum) is significantly less than the electron path in it. This is the reason for the presence of high-energy electrons in bremsstrahlung. Therefore, there is a need to clean the bremsstrahlung beams from residual electrons. The aim of the work is to experimentally determine the optimal parameters (thicknesses) of double-layer targets for obtaining separated bremsstrahlung beams for an energy range of $6.5 \div 17.75$ MeV in electron accelerator M-30 microtron.

Methods. Experimental studies of the relative absorption coefficient of electrons in the investigated materials (C (reactor graphite), Al, Ta) were carried out on the M-30 microtron using the transmission method. The measurements of the outputs of the electrons from the accelerator and the residuals that have passed through the layer of absorbing material were carried out using a pass-through chamber and a Faraday cup, respectively. Studies of the absorption of high-energy photons by single-layer targets (C (20 mm), Al (20 mm)) using activation detectors have been carried out.

Results. The electron absorption coefficients in single- (C ($7 \div 46$ mm), Al ($8 \div 48$ mm), Ta ($0.1 \div 1$ mm)) and in double-layer targets (Ta (1 mm) + C ($7 \div 39$ mm) and Ta (1 mm) + Al ($8 \div 40$ mm)) were measured for the electron energy $6.5 \div 17.75$ MeV. The values of the total electron absorption thickness for C, Al, and Ta are in good agreement with the calculated values of the practical electron path (database «ESTAR») for the indicated energy range. The experimentally established values of the thicknesses of materials (C and Al at a thickness of Ta – 1 mm) of double-layer targets, which ensure the complete absorption of electrons for the indicated energy range. The absorption of high-energy photons by single-layer targets (C (20 mm), Al (20 mm)) for bremsstrahlung energy of 17.5 MeV was evaluated.

Conclusions. The optimal parameters (thicknesses) of double-layer targets (Ta (1mm) + C (20 mm) and Ta (1 mm) + Al (20 mm)) or (Ta (1mm) + C (39 mm) and Ta (1 mm) + Al (32 mm)) were established experimentally to form the separated bremsstrahlung beams in the electron accelerator – M-30 microtron for energy region $6.5 \div 17.75$ MeV. The use of two-layer targets allows us to carry out procedures to form of high-energy photon beams with the parameters necessary for performing specific experimental studies on electronic accelerators, which will increase the accuracy and reliability of the results.

Keywords: microtron, bremsstrahlung, residual electrons, electron absorption, double-layer targets.

REFERENCES

- [1] Starovoitova, V., Segebade, C. (2016), «High intensity photon sources for activation analysis», J. Radioanal. Nucl. Chem., V. 310, Iss. 1, pp. 13–26.
- [2] Shahzad A., Phatangare A.B., Bharud V.D., Bhadane M.S., Tahakik C.D., Patil B.J., Dahi-wale S.S., Chavan S.T., Pethe S.N., Dhole S.D., Bhoraska V.N. (2017), «Design and development of the 6 – 18 MeV electron beam system for medical and other applications», Radiation effects & Defects in solids., V. 172, Iss. 11-12, pp. 931–951.

- [3] Versteegen M., Denis-Petit D., Meot V., Bonnet T., Comet M., Gobet F., Hannachi F., Tarisien M., Morel P., Martini M., Peru S. (2016), «Low-energy modification of the γ -strength function of the odd-even nucleus ^{115}In », *Phys. Rev. C.*, V. 94. 044325, p. 13
- [4] Ko J., Kim B.Y., Kim Y.S. (2017), «Characteristic analysis of a photon converter in a medical linac using GEANT4», *Vibroengineering Procedia*, V. 14., pp. 256–259.
- [5] Dixon D.A., Hughes H.G.(2017), «Validation of the MCNP6 electron-photon transport algorithm: multiple-scattering of 13 - and 20 - MeV electrons in thin foils», *EPJ Web of Conferences*, V. 153. 06021, p. 6.
- [6] Kovalev V.P., Kharin V.P., Gordeev V.V., Borisov M.S.(1971), «Dependence of bremsstrahlung yield on target thickness and atomic number for 12 – 22 MeV electrons», *At Energy*, V. 31, Is. 3, pp. 1028–1031.
- [7] Kim Y.S., Khazaei Z., Ko J., Afarideh H., Ghergherehchi M. (2016), «Estimation of photoneutron yield in linear accelerator with different collimation systems by Geant4 and MC-NPX simulation codes», *Phys. Med. Biol.*, V. 61, pp. 2762–2779.
- [8] Hai-Bo Xu, Peng Xian-Ke P., Chao-Bin C. (2010), «Monte Carlo simulation for bremsstrahlung and photoneutron yields in high-energy x-ray radiography», *Chin. Phys. B.*, V. 19. 062901, pp. 1–8.
- [9] «Electron and Photon attenuation», available at: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/ESTAR.html>
- [10] Varlamov A.V., Varlamov V.V., Rudenko D.S., Stepanov M.E. (1999), «Atlas of giant dipole resonance parameters and graphs of photonuclear reaction cross sections», NDC(NDS)-399, Int. Atomic Energy Agency, Int. Nuclear Data Committee. Vienna, p. 321.
- [11] Ishkhanov B.S., Troschiev S.Yu. (2010), Bremsstrahlung target for studying «g photonuclear reactions in the giant dipole resonance energy region» [«Tormoznaya mishen' dlya issledovaniya fotoyadernykh reaktsiy v oblasti energiy gigantskogo dipol'nogo rezonansa»], *Moscow University Physics Bulletin*, V. 65, No. 1, pp. 39–42.
- [12] Gil Y.M., Lee Y.S., Cho M.H., Namkung W. (2004)), «Monte Carlo simulation study of bremsstrahlung produced by 9 MeV electron linear accelerator», *KPS Conference Posters in Physics*. Sungkyunkwan University, p. 8.
- [13] Sujoy C., Bandyopadhyay T., Roy A., (2015), «Study of the variation of photo-neutron spectrum with various moderators generated using electron linac», *roceedings of the seventh DAE-BRNS Indian particle accelerator conference: book of abstracts*. Mumbai, India, p. 3.
- [14] Virgil'ev Yu.S., I.P. Kalyagina I.P. (2003), «Reactor Graphite», *Inorganic Material*, V. 39 (1), pp. S46–S58.
- [15] Virgiliev Yu.S., Seleznev A.N., Sviridov A.A., Kalyagina I.P. (2006), «Reactor graphite: development, production and properties» [«Reactornui grafit: razrabotka, proizvodstvo i svoistva»], *Russian Chemical Journal*, V. 50, No 1, pp. 4–12.
- [16] Bakalyarov A.M., Karetnikov M.D., Lebedev V.I., Yakovlev G.V. (2009), «Optimization of the extraction facilities of an electron accelerator - bremsstrahlung source for the pulsed photonuclear metod», *Atomic Energy*, V. 106, No. 3, pp. 206–212.

- [17] Parlag O.O., Lengyel A.I., Holovey V.M., Maslyuk V.T., Marynets T.Y., Byrov M.M. (2010), «Determination of photoneutrons content in microtron M-30 bremsstrahlung by activation detectors», [«Vyznachennya vmistu fotoneutroniv u hal'mivnomu vyprominnyuvanni mikrotrona M-30 aktyvatsiynomy detectoramy»], Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Physics [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fis], Iss. 28, pp. 99–106.
- [18] Thiep T.D., An T.T., Khai N.T., Vinh N.T., Cuong P.V., Gangrski Iu.P., Belov A.G., Maslo O.D. (2012), «Determination of the total bremsstrahlung photon flux from electron accelerators by simultaneous activation of two monitors», Phys. Part. Nuclei Lett., V. 9, pp. 648–655.
- [19] Skakun Ye., Semisalov I., Kasilov V., Popov V., Kochetov S., Maslyuk V., Mazur V., Parlag O., Gajnish I. (2016), «Reaction rates of the $^{113}\text{In}(\gamma, n)^{112m}\text{In}$ and $^{115}\text{In}(\gamma, n)^{114m}\text{In}$ », J. Phys.: Conf. Ser., V. 665. 012040, pp.1–4.
- [20] «Decay Radiation database version of 1/3/2018», available at: <https://www.nndc.bnl.gov/nudat2/indxdec.jspl>
- [21] Lengyel A.I., Parlag O.O., Maslyuk V.T. (2009), «Semiempirical description of Ge(Li) – and HPGe – detectors efficiency for potofission experiments», [«Napivempirychne opysannya absolyutnoyi efektyvnosti Ge(Li) – ta HPGe – detektoriv dlya fotopodil'nykh eksperimentiv»], Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Physics [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fis], Iss. 25, pp. 95–99.
- [22] Pylypchynets I., Lengyel A., Parlag O. Maslyuk V., Potoki I. (2019), «Empirical formula for the HPGe-detector efficiency dependence on energy and distance», J Radioanal Nucl Chem, V. 319, pp. 1315–1319.

©Ужгородський національний університет

УДК 621.384.6+539.1.05
PACS 29.20.-с
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.61-72

І.А. Хомич, Т.В. Ковалінська, В.І. Сахно

Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ, Україна

РАДІАЦІЙНІ ПРОБЛЕМИ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ВИПРОБУВАНЬ ОБЛАДНАННЯ АЕС НА ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІЙ УСТАНОВЦІ ІЯД НАН УКРАЇНИ

Обговорюються методика і програма заходів, розроблена для вимірювань інтенсивності радіаційних полів в приміщеннях експериментальної установки ІЯД та на прилеглій території в режимах генерації інтенсивних потоків електронів, гальмівного гама-випромінювання, та змішаних гама-електронних радіаційних полів, відповідуючих умовам гермозони ядерних реакторів.

Ключові слова: кваліфікація обладнання АЕС, радіаційні поля, гальмівне випромінювання, радіаційний моніторинг, радіаційний захист.

Вступ

Актуальність проблеми визначається вимогами підвищення експлуатаційної надійності критичних об'єктів сучасної економіки. Значною мірою це стосується ядерної енергетики, експлуатація якої є вкрай необхідною але і найбільш складною задачею енергетичного сектору економіки України. Особливо з урахування довгострокових планів подальшого розвитку цієї галузі та програми продовження терміну експлуатації ядерних енергоблоків на період до 2035-го року [1]. Найважливішим завданням є забезпечення максимально високого рівня безпеки експлуатації ядерних об'єктів [2].

Метою даних досліджень є створення в ІЯД НАН України імітатора, радіаційних полів в герметичних зонах реакторів для сертифікації і кваліфікації критичного обладнання АЕС на предмет придатності використання на ядерних енергетичних об'єктах, як це вказано в нормативних документах і стандартах України та міжнародних рекомендаціях МАГАТЕ [3, 4].

Аналіз поточного стану проблеми

Випробування і кваліфікація критичного обладнання енергетичних об'єктів є важливою частиною технологічних заходів обслуговування об'єктів в ядерній енергетиці, визначає їх експлуатаційну надійність, радіаційну і екологічну безпеку, собівартість виробленої енергії [5]. Удосконалення вказаних технологій є актуальною науково-технічною проблемою.

В ІЯД НАН України такі дослідження проводяться з 90-х років минулого століття. Розроблено нову комплексну технологію випробувань критичного обладнання, яка ґрунтується на одночасному (комплексному) відтворенні (імітації) на спеціалізованих стендах максимального об'єму експлуатаційних і несприятливих факторів [6], в тому числі і кризових ситуаціях. Запропонована методика залучення до створення стендів-імітаторів прискорювачів заряджених частинок, при умові доукомплектування їх спеціалізованими пристроями. Доведено, що першочерговим завданням для такого імітатора є радіаційні функціональні випробування електротехнічного устаткування в гермозонах з си-

стем водообороту в реакторі (кабелі, електроприводи, ізолятори, прохідні ізолюючі муфти та інше, з переліку, затвердженого НАЕК). Об'єктивно, такий стенд можна в короткий термін створити на базі радіаційної установки ІЯД НАН України.

Технічна база для створення імітатора

Радіаційна установка ІЯД для радіаційних досліджень побудована на потужному електронному прискорювачі, параметри якого наведено в таблиці 1.

Табл. 1: Параметри радіаційної установки ІЯД.

№	Характеристики прискорювача	Значення
1	Середня енергія електронів, МеВ	4
2	Ширина енергетичного діапазону, МеВ	1 ÷ 5
3	Струм пучка в імпульсі 4 мкс, (А)	1
4	Мінімальний переріз пучка, мм	5
5	Максимальний переріз пучка (см)	100×100
6	Максимальна потужність, пучка, кВт	5
7	Імпульсна потужність, МВт	5
8	Потужність дози, кГр/с (макс)	20

Табл. 2: Нормативні вимоги до умов кваліфікації електротехнічного обладнання для використання в гермозоні ядерного реактора ВВЕР-1000.

Критичний параметр	Значення критичного параметру (макс.)	Термін роботи в критичних умовах, годин (мінімальний)	Примітки
Потужність дози (для гамма-опромінення), максимальна, Гр/сек	$1,25 \times 10^{-2}$	16	
Хімічний склад середовища:			
Пароводяна суміш (макс.)		1	
Паро газова суміш з борною кислотою (макс.), г/дм ³	160	16	
Гідразин, (макс.) г/дм ³	10	16	
Іони калію, (макс.) г/дм ³	100	16	
Температура, (макс.), °C	147	16	
Тиск, (макс.), МПа	0,43	16	
Вологість, (макс.), %	100	16	

Установка [7] забезпечує виконання різноманітних наукових досліджень, технологічних розробок та реальних промислових радіаційних технологій. Вона відрізняється великим об'ємом реакційної камери (64 м³), де можна встановлювати об'єкти великих розмірів і обробляти їх стаціонарним радіаційним полем великого перерізу (до 1 м²). Поки що за цими показниками установки

аналогів в Україні немає. А постійне удосконалення вузлів установки впритул наблизило її до можливості створення стенду-імітатора для випробування обладнання АЕС в умовах, наближених до реальних [8, 9]. В даний час роботи по створенню імітатора вступають в стадію завершення.

Для такого імітатора фахівцями ІЯД розроблена комплексна технологія атестації і

кваліфікації обладнання шляхом радіаційних випробувань стійкості його функціональних характеристики в робочому режимі. Перелік цих факторів було встановлено аналізом діючих нормативних документів для експлуатації вітчизняних АЕС [10]. Вони узагальнені в таблиці 2.

Табл. 3: Порівняння технічних параметрів установки ІЯД з нормативними вимогами до кваліфікаційних випробувань.

Технологічні показники	Нормативні вимоги	Параметри установки
Об'єм реакційної камери	Близько 10 м^3	Понад 20 м^3
Інтенсивність радіаційного навантаження	До $1 \times 10^3 \text{ Гр/год}$	від $0,1 \text{ Гр/год}$ до $14,4 \times 10^6 \text{ Гр/год}$
Параметри радіаційних полів	змішані (наявні β -, γ -, та нейтронна компоненти)	регулювання співвідношень чинників радіації
Переріз радіаційного поля	до 1 м^2	до $80 \times 80 \times 120 \text{ см}^3$
Опромінюваний об'єм	$1 - 1,5 \text{ м}^3$	до 2 м^3
Контроль процесів опромінювання	До 8%	датчик струму пучка: 25%
Дозиметрія опромінення	До 8%	індикатори поглинутої дози термолюмінесцентні: 15%
Час опромінення	Від 16 до 1000 годин	до 8 годин безпервно
Нестабільність радіаційного поля	До 8%	дрейф параметрів прискорювача: до 20% за добу

Як видно з таблиці 3, вирішена основна проблема застосування установки ІЯД для випробування обладнання АЕС – формування радіаційних полів великих об'ємів (до 2 м^3) з глибоким регулюванням їх інтенсивності і складу – у відповідності з очікуваними габаритами обладнання. Аналоги такої техніки в Україні відсутні.

Проблеми введення імітатора в експлуатацію

Для того, щоб скористатися вказаними можливостями експериментальної бази ІЯД, необхідно вирішити останнє з обов'язкових заходів створення імітатора – забезпечити надійний радіаційний захист персоналу і довкілля при імітації в реакційній камері установки потужних радіаційних полів. Але поки що радіаційні проблеми здійснення функціональних випробувань обладнан-

В результаті глибокої модернізації отримано необхідні значення фізичних параметрів установки, що в значній мірі відповідають нормативним вимогам для проведення нових технологій кваліфікації обладнання АЕС (таблиця 3).

ня АЕС на установці ІЯД досліджені менше проблем технічних.

Технологіями комплексних методів кваліфікації передбачається конверсія потужних потоків електронів $4 - 5 \text{ MeV}$ в енергію фотонів пікометрового (іонізуючого) діапазону електромагнітних коливань. На такі умови експлуатації прискорювача існуючий радіаційний захист не розраховувався. Стоїть завдання вирішити його на етапі завершення технічних заходів утворення імітатора, шляхом вимірювання деформації радіаційних полів в технологічному боксі прискорювача та на прилеглий території.

Програма вимірювань охоплює контроль за динамікою розподілу супутніх випромінювань в усіх режимах експлуатації радіаційної установки – опромінення легких матеріалів (традиційна), опромінення електронами крупних об'єктів з важких металів, деформація конфігурації побічних випромінювань в боксі прискорювача при роботі з

напівпрозорими гальмівними мішенями, та опромінення крупних об'єктів з важких металів електронами через «товсту» гальмівну мішень.

За вихідний розподіл радіаційного поля в боксі прискорювача прийнято розподіл

при опроміненні об'єктів з легких матеріалів (не вище заліза). На рис. 1 наведена ілюстрація розподілу побічних гальмівних випромінювань в боксі прискорювача при опроміненні великогабаритних промислових виробів з органічних матеріалів.

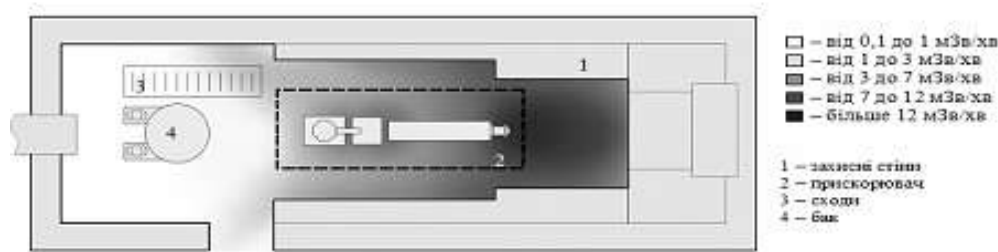


Рис. 1: Вимірний розподіл радіаційного поля в приміщенні боксу прискорювача.

Для цих режимів радіаційний захист корпусу повністю відповідає ОСП для прискорювачів електронів до 100 MeV [11].

Згідно з теоретичними положеннями взаємодії іонізуючих випромінювань з важкими матеріалами та можливі шляхи деформації існуючої на установці радіаційної обстановки. Очікується суттєва деформація наведеного розподілу радіації в приміщеннях установок, та, можливо, і на прилеглий території. Через наявність цілої низки супутніх ефектів взаємодії електронів з речовиною та неоднозначність визначення параметрів супутнього гальмівного випромінювання для розрахунків нового радіаційного захисту, необхідні додаткові дослідження і розробки з метою створення економічно привабливих конструкцій біологічного захисту [12, 13]. При їх проектуванні доцільно виходити з реального розподілу гальмівного випромінювання при повному поглинанні електронного пучка в мішені, виготовлених з самого важкого матеріалу, що може входити до складу конструкцій піддослідного обладнання АЕС. Слід зазначити, що вже при потужності пучка електронів більше ніж 1 кВт, навіть при енергії 1 MeV, проектування захисту є складною технічною проблемою.

Теоретичний аналіз процесів виникнення і поширення вторинних фотонів при опроміненні електронами критичного обладнання АЕС

При проектуванні нового радіаційного захисту можна було б скористатися спрощеними емпіричними формулами, що зв'язують альbedo енергії розсіяного випромінювання з енергією первинних гама-квантів E_0 , кутом падіння первинного вузького пучка θ_0 , атомним номером Z і щільністю ρ речовини розсіювача. Шляхом розрахунків коефіцієнтів поглинання для вибраного матеріалу, що дає можливість оптимізувати геометрію додаткових засобів радіаційного захисту в будь-якому перерізі боксу. Для цього зазвичай використовують таблиці експериментальних даних. Але в опублікованих таблицях, така інформація є тільки для ізотопних джерел випромінювання з енергією до 1,25 MeV [14, 15].

В нашому випадку первинне випромінювання є результатом конверсії енергії 4 MeV електронів на атомах матеріалу обладнання. Максимальна енергія гама-квантів складає 4 MeV. Випромінювання має суцільний спектр (практично з 50 – 70 keV) з великою нерівномірністю і максимумом в діапазоні 1 – 2 MeV.

В радіаційних технологіях кваліфікації діє класичний механізм конверсії енергії

випромінювання на атомах важких елементів. Наприклад утворенням пар електрон-позитрон розпочинається вже з енергій більших за 1 MeV. А в області 3 – 4 MeV переріз їх утворення зростає майже пропорційно $\ln E_0$ і більш інтенсивно при збільшенні атомного номера поглинаючої речовини. До електротехнічного обладнання можуть входити елементи з платини, родію та їх сплавів, вольфраму, золота, свиню та його сплавів та ін. Як результат слід очікувати суттєвий вклад в супутнє радіаційне поле в реакційній камері установки вторинних жорстких гама-квантів з енергією близько 0,5 MeV в тому числі і в задню напівсферу, утворюючи потоки зворотно розсіяного гама-випромінювання. Визначення потужності дози розсіяного випромінювання є задачею оцінки інтенсивності електромагнітного випромінювання, що виникає як результат взаємодії падаючих гама-квантів з атомами елементів поглинаючої поверхні (матеріалом конструкції, бетонних стін, опромінених зразків) в тому числі і частка таких випромінювань, що реально поступає (хоч і ослаблене) в оточуюче середовище з зовнішньої поверхні стін біологічного захисту.

Для цього теорія рекомендує перший ешелон ослаблення побічного випромінювання встановити вже поблизу області, де відбувається гальмування пучка і, по можливо-

сті, максимально скоротити траєкторію руху електронів до мішені. Останню вимогу виконати неможливо, тому що у нашому випадку передбачається опромінення обладнання АЕС великих розмірів (близько 2 м³). Є тільки один шлях – ешелонований захист і розташування першого ешелону радіаційного захисту якомога ближче до реакційної камери установки. Така методика конструювання, згідно опублікованих даних [12], забезпечує зростання ефективності захисту не менше ніж на 15 – 20%. Оптимальне місце розташування першого ешелону захисту можна встановити лише експериментально шляхом натурного моделювання радіаційних функціональних випробувань на еквівалентах об'єкта. Після введення таких мір можна більш точно контролювати вплив інших додаткових факторів побічного випромінювання. Наприклад, додаткове розсіяння фотонів і деформація їх спектрів в неробочих просторах боксу прискорювача.

Теретично інтенсивність та конфігурацію джерел виникнення та напрямків поширення розсіяних випромінювань (через невідомість типу і місцеположення матеріалів в досліджуваному об'єкті) можна лише оцінювати з великою похибкою. Приблизний спектр розсіяних випромінювань при взаємодії гама-квантів з матеріалами піддослідного обладнання можна оцінити з даних, наведених в таблиці 4 [14].

Табл. 4: Основні процеси взаємодії гама-випромінювання з найбільш поширеними конструкційними матеріалами (в порівнянні з повітрям).

Речовина	Фотоефект	Комптонівське Розсіювання	Утворення пар
Алюміній	$E < 50 \text{ keV}$	$50 \text{ keV} < E < 15 \text{ MeV}$	$E > 23 \text{ MeV}$
Залізо	$E < 120 \text{ keV}$	$120 \text{ keV} < E < 9,5 \text{ MeV}$	$E > 15 \text{ MeV}$
Свинець	$E < 500 \text{ keV}$	$500 \text{ keV} < E < 4,7 \text{ MeV}$	$E > 4,7 \text{ MeV}$
Повітря	$E < 20 \text{ keV}$	$20 \text{ keV} < E < 23 \text{ MeV}$	$E > 23 \text{ MeV}$

Але з врахуванням, що спектр гальмівного випромінювання при взаємодії електронів 4 – 5 MeV з важкими матеріалами (важкими заліза) має велику складову фотонів високої енергії, таке спрощення недопустиме. Коректними розрахунки будуть лише з урахуванням особливостей кутового розподілу інтенсивності гама-випромінювання при

гальмуванні електронів максимальної енергії [13], зміни спектрального складу гальмівного випромінювання при проходженні через захист: завдяки поглинанню частини низькоенергетичних фотонів; гальмівного випромінювання дифузної частини електронів; пучка гальмівного випромінювання від вторинних електронів; вкладу фотонів

високої енергії в спектрі побічного випромінювання; розсіяння фотонів та їх деградація.

Слід зауважити, що в наведених формулах враховуються лише однократно та багатократно розсіяні фотони первинного випромінювання (що є результатом гальмування пучка прискорених електронів) у всьому діапазоні енергій, але не враховано гальмівне випромінювання комптонівських електронів. Тому для точного розрахунку радіаційного захисту необхідна додаткова інформація щодо зворотного розсіяння гамма-квантів від джерел випромінювання, еквівалентних таким, що розміщені на поверхні розсіювача.

Підставою до започаткування даних досліджень був аналіз теоретичних положень взаємодії іонізуючої радіації з матеріалами. Оцінка очікуваної інтенсивності нових джерел випромінювань та напрямків їх поширення здійснювалась за моделями зв'язності іонізуючих випромінювань з матерією.

Випромінювання в результаті першого акту взаємодії фотона з атомом по комптонівському механізму оцінено за диференційними характеристиками, диференційним енергетичним альбедо та диференційним числовим альбедо (кутовий розподіл відбитої енергії, кутовий розподіл відбитих квантів) [13, 17], розрахованих за напівемпіричною формулою Клейна-Нішини-Тамма. Кутовий розподіл гальмівного випромінювання для попередньої оцінки оптимальних показників поглинання його в матеріалі біологічного радіаційного захисту визначався за формулою Лаусона. Для розрахунків розсіяння гамма-квантів більш високих енергій для

кутів відбивання $0 - 85^\circ$, використано емпіричну формулу Хаггемарка.

Досліди, в тому числі і в ІЯД [18], проведені для різних джерел гамма-випромінювання, свідчать, що розсіяне випромінювання носить яскраво виражений анізотропний характер з максимумом інтенсивності на кутах, близьких до 90° і сильно залежить від параметрів відбиваючих матеріалів.

З урахуванням вмісту у складі електротехнічного обладнання АЕС значних об'ємів свинцю в чистому вигляді і у сплавах, платини та її сплавів, необхідно досліджувати наслідки взаємодії електронів з матеріалом (і їх композиціями в обладнанні) більш докладно. А з урахуванням високої ступені невизначеності місцезнаходження і вмісту цих матеріалів у обладнанні, проведення спеціальних експериментальних досліджень є обов'язковим, і мабуть, для усіх перелічених в нормативних матеріалах типів обладнання і устаткування. І лише з їх урахуванням розробляти конструкції відповідних захисних споруд та підбирати для них матеріали.

Програма радіаційних досліджень

Корисним результатом попередніх оцінок є визначення очікуваного діапазону енергії гальмівних, розсіяних та зворотно розсіяних гамма-квантів. За результати таких розрахунків було вибрано датчики радіаційних полів, якими укомплектовано систему радіаційних вимірювань на створюваному імітаторі (рис. 2).



Рис. 2: Дозиметри для вимірювання радіаційних полів.

Вибрані дозиметри мають лінійну характеристику у розрахованому діапазоні енергії гальмівних випромінювань, вторинних, розсіяних та зворотно розсіяних гама-

квантів. Програма досліджень ґрунтується на системі з 40 інтегруючих дозиметрів поглинутої дози рис. 3.

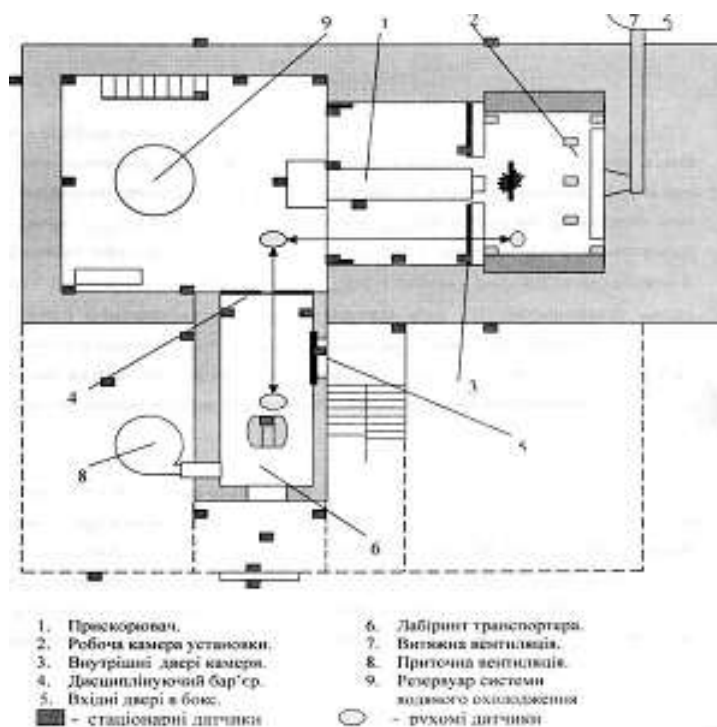


Рис. 3: Схема системи моніторингу радіаційної обстановки.

Дослідження передбачено здійснювати в режимі максимального струму пучка 1 А від прискорювача електронів 4 MeV, при частоті їх слідування 250 Гц з контролем режиму прискорювача штатними засобами вимірювання з похибкою менше 20 %.

Висновки

1. Досліджено перспективні напрямки удосконалення технології сертифікації і кваліфікації критичного обладнання гермозон АЕС. Встановлено, що умовою отримання коректних результатів є використання спеціалізованих радіаційних стендів, здатних моделювати в комплексі усі складові експлуатаційних факторів і реєструвати увесь перелік технічних параметрів, що характеризують об'єкт досліджень. Тому актуальним є створення вітчизняного дослідницького комплексу для проведення оперативних комплексних кваліфікаційних випробувань зразків

обладнання українських енергоблоків.

2. Доведено, що при умові модернізації радіаційного захисту, радіаційну установку ІЯД НАН України з лінійним прискорювачем електронів 4 MeV можна використовувати для імітації радіаційних полів в гермозонах атомних реакторів і здійснювати функціональні радіаційні випробування елементів ядерних енергоустановок, розміри яких не перевищують 800 мм.

3. Теоретично досліджено механізми деформації радіаційного поля в приміщенні прискорювача електронів 5 MeV, які можна очікувати при опроміненні критичного обладнання гермозон атомних реакторів. Визначено ймовірні значення енергії та інтенсивності побічного супутнього випромінювання при опроміненні важких матеріалів, які містяться в складі піддослідного обладнання.

4. Обґрунтована необхідність здійснення експериментальних досліджень реальних радіаційних полів в різних режимах функціональних радіаційних досліджень обладнан-

ня. Розроблена програма радіаційного моніторингу за допомогою системи дозиметрів в реакційній камері установки ІЯД, технологічних приміщеннях та поза її межами. Вибрано і обґрунтовано оптимальні типи датчиків для дозиметрії радіаційної обстановки в режимі опромінювання критичного обладнання АЕС.

Реалізація програми досліджень і модернізації радіаційного захисту надасть можливість здійснювати радіаційні випробувань і кваліфікацію критичного обладнання АЕС згідно з вимогами нормативних до-

кументів в умовах, що будуть максимально наближеними до експлуатаційних. В першу чергу електротехнічного обладнання з гермозон ядерних енергетичних реакторів, важливих для безпеки АЕС, наприклад – електропривід типу М 76341, що використовується з арматурами систем аварійного газовидалення з першого контуру, захисту першого контуру від перевищення тиску та системи локалізуючих арматур, кабелі, гермопроходки, ізолятори. Для такого обладнання розрахункова нерівномірність опромінення на даному етапі не перевищуватиме 25 %.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Енергетична стратегія розвитку України до 2035 року [Електроний ресурс]. – Режим доступу: <http://mpe.kmu.gov.ua/minugol/doccatalog/document?id=245213112>.
- [2] Convention on Nuclear Safety [Електроний ресурс]. – Режим доступу: <https://www.iaea.org/sites/default/files/infocirc449.pdf>.
- [3] Загальні положення безпеки атомних станцій: НП 306.2.141-2008. – Офіц. вид. – К.: Державний комітет ядерного регулювання України, 2008. – 59 с. – (Норми та правила з ядерної та радіаційної безпеки).
- [4] Кваліфікація обладнання і технічних пристроїв АЕС. Загальні вимоги : СТП 0.03.050-2009. – Офіц. вид. – К. : НАЕК, 2009. – 78 с. (Стандарти ДП «НАЕК» «ЕНЕРГОАТОМ»).
- [5] Кваліфікація обладнання на умови навколишнього середовища. Загальні вимоги : СТП 0.03.083-2009. – Офіц. вид. – К. : НАЕК, 2009. – 83 с. (Стандарти ДП «НАЕК «ЕНЕРГОАТОМ»).
- [6] Сахно О.В. Дослідження і розробка проблем радіаційних випробувань обладнання на електрофізичних установках : автореф. дис. на здобуття наук. ступення канд. наук: спец. 05.14.14 «Теплові та ядерні енергоустановки» / О.В. Сахно. – К., 2008. – 21 с.
- [7] Вишневський І.Н. Радиационная установка с ускорителем электронов ИЯИ НАН Украины / И.Н. Вишневський, А.Г. Зелінський, В.І. Сахно, С.П. Томчай, А.В. Сахно // Атомная энергия. – 2003. – Т. 94.– Вып. 2. – С. 163–166.
- [8] Вишневський І.М. Спеціалізований стенд для функціональних випробувань кабельних виробів АЕС /І.М. Вишневський, В.І. Сахно, О.В. Сахно, А.Г. Зелінський, С.П. Томчай, Т.В. Хрін, Н.В. Халова // Ядерна фізика та енергетика. – 2007. – №1 (19). – С. 140–144.
- [9] Вишневський І.М. Проблеми радіаційних випробувань кабелів АЕС на установці ІЯД/ І.М. Вишневський, В.І. Сахно, О.В. Сахно, А.Г. Зелінський, С.П. Томчай, Т.В. Хрін // Вопросы атомной науки и техники. – 2007. – № 6. – С. 128–130.
- [10] Программа работ по квалификации оборудования энергоблоков АЭС ГП «НАЭК» «Энергоатом»: ПМ-Д.0.03.476-09. – Офиц. изд. – К.: НАЭК, 2009. – 56 с. (Стандарты ГП «НАЭК» «Энергоатом»).

- [11] Основні санітарні правила забезпечення радіаційної безпеки України: ДСП 6.177-2005-09-02. — Офіц. вид. — К. : МОЗ України, 2005. — 84 с. (Санітарні правила).
- [12] Гусев Н.Г. Защита от ионизирующих излучений: в 2 т. / Н.Г. Гусев. — М.: Энергоатомиздат, 1989—1990. — Т. 2: Защита от излучений ядерно-технических установок. — 1990. — 351 с.
- [13] Проблеми оптимізації протирадіаційного захисту промислових радіаційних технологічних установок: матеріали XVI Міжнар. конф. по фізиці радіаційних явищ та радіаційному матеріалознавстві, 6–11 вересня 2004 р. Алушта, Крим / відп. Ред. В. М. Воєводін. — Х.: ННЦ ХФТІ — 2004. — С. 286–287.
- [14] Булатов Б.П. Обратное рассеянное гамма-излучение в радиационной технике / Булатов Б.П. — М.: Атомиздат, 1971. — 239 с.
- [15] Амусья М.Я. Тормозное излучение / Амусья М.Я. — М.: Энергоатомиздат, 1990. — 208 с.
- [16] Жучко В.Е., Ципенюк Ю.Б. Расчет спектров тормозного излучения под различными углами в диапазоне энергий 1–30 МэВ / В.Е. Жучко, Ю.Б. Ципенюк // Атомная энергия. — 1975. — Т. 39, Вып. 1. — С. 66–68.
- [17] Стародубцев С.В. Взаимодействие гамма-излучения с веществом / С.В. Стародубцев, А.М. Романов. — Ташкент: Наука, 1964. — 67 с.
- [18] Сахно В.І. Дослідження розсіяного випромінювання лінійного прискорювача електронів / В.І. Сахно, І.М. Вишневський, Т.В. Хрін, О.В. Сахно, А.Г. Зелінський, С.П. Томчай, Н.В. Халова // Ядерна фізика та енергетика. — 2007.— №2 (20). — С. 126–130.

Стаття надійшла до редакції 04.06.2019

И.А. Хомич, Т.В. Ковалинская, В.И. Сахно

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев, Украина

РАДИАЦИОННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ИСПЫТАНИЙ ОБОРУДОВАНИЯ АЭС НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКОЙ УСТАНОВКЕ ИЯИ НАН УКРАИНЫ

Обсуждается методика и программа мероприятий, разработанная для измерений интенсивности радиационных полей в помещениях экспериментальной установки ИЯИ и на прилегающей территории в режимах генерации интенсивных потоков электронов, тормозного гамма-излучения, и смешанных гамма-электронных радиационных полей, отвечающих условиям гермозоны ядерных реакторов.

Ключевые слова: квалификация оборудования АЭС, радиационные поля, тормозное излучение, радиационный мониторинг, радиационная защита.

I.A. Khomych, T.V. Kovalinska, V.I. Sakhno

Institute of Nuclear Research, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

RADIATION PROBLEMS OF FUNCTIONAL TESTING OF NUCLEAR POWER PLANT EQUIPMENT AT AN ELECTROPHYSICAL INSTALLATION OF THE INR OF NAS OF UKRAINE

Purpose. The purpose of the research is the creation of a domestic research complex for operational complex qualification tests of equipment samples of the Ukrainian power units. It is shown that it is advisable to create such a complex on the basis of the radiation installation of the Institute of Nuclear Research of the National Academy of Sciences of Ukraine with a powerful electron accelerator of 4 MeV, subject to the modernization of radiation protection.

Methods. The method and program of measures developed to measure the intensity of radiation fields in the premises of the INR of NAS of Ukraine experimental installation and in adjacent territories in the generation modes of intense electron fluxes, bremsstrahlung gamma radiation and mixed gamma electron radiation fields similar to the conditions of nuclear reactor pressure zones are discussed. A list of associated effects affecting the radiation situation in the premises of the facility and in the surrounding area during irradiation of critical equipment with a high content of heavy metals has been theoretically investigated. The expected intensity and spectrum of bremsstrahlung and scattered gamma radiation has been established.

Results. The necessity of carrying out experimental studies of real radiation fields in various modes of functional radiation studies of equipment has been substantiated. A program of radio monitoring has been developed through a dosimeter system in the reconnaissance chamber of an INR facility, technological rooms and beyond. An optimal list of sensors for radiation monitoring dosimeters has been selected and substantiated in the mode of irradiation of critical equipment important to NPP safety, primarily electrical engineering (for example, electric actuators of type M 76341, cables, germprojects, insulators). The current problems of developing certification technologies and qualifying critical equipment for pressurized nuclear power plants using specialized radiation stands capable of simulating (reproducing) in a complex all the components of operational factors and recording the entire list of technical parameters characterizing the object of research are investigated.

Conclusions. The perspective directions of improving the certification technology and qualification of critical equipment of the nuclear power plant containment area are investigated. It has been established that the condition for obtaining correct results is the use of specialized radiation stands capable of modeling in a complex all components of operational factors and recording the entire list of technical parameters characterizing the object of research. It has been proven that with the improvement of the biological radiation protection system, the installation can be used to simulate radiation fields in the hermetic zones of nuclear reactors and carry out functional radiation tests of nuclear power plant components, with dimensions up to 800 mm. The necessity of experimental studies of real radiation fields in various modes of functional radiation research of equipment is substantiated.

Keywords: qualification of NPP's equipment, radiation fields, bremsstrahlung, radiation monitoring, radiation protection.

REFERENCES

- [1] «Energy strategy of Ukraine's development till 2035» [«Enerhetychna stratehiya rozvytku Ukrayiny do 2035 roku»], available at: <http://mpe.kmu.gov.ua/minugol/doccatalog/document?id=245213112>.
- [2] «Convention on Nuclear Safety», available at: <https://www.iaea.org/sites/default/files/infcirc449.pdf>.

- [3] «General safety regulations for nuclear power plants» [«Zahal'ni polozhennya bezpeky atomnykh stantsiy»]: SP 306.2.141–2008, State Committee for Nuclear Regulation of Ukraine, Kiev, 59 p.
- [4] «Qualification of equipment and technical devices of the NPP's. General requirements» [«Kvalifikatsiya obladnannya i tekhnichnykh prystroyiv AES. Zahal'ni vymohy»]: ES 0.03.050–2009, NNEGC, Kiev, 78 p.
- [5] «Qualification of equipment for environmental conditions. General requirements» [«Kvalifikatsiya obladnannya na umovy navkolyshn'oho seredovyscha. Zahal'ni vymohy»]: ES 0.03.083–2009, NNEGC, Kiev, 83 p.
- [6] Sakhno, O.V. (2008), Research and development of problems of radiation testing of equipment at electrophysical installations: Author's abstract [«Doslidzhennya i rozrobka problem radiatsiynykh vyprobuvan' obladnannya na elektrofizychnykh ustanovkakh : avtorref. dys. na zdobuttya nauk. stupennya kand. nauk»], Kyiv, 21 p.
- [7] Vyshnevskyy, I.M., Zelinskyy, A.G., Sakhno, V.I., Tomchay, S.P., Sakhno, A.V. (2003), «Radiation facility with electron accelerator of the Institute for Nuclear Research of Ukraine» [«Radiatsionnaya ustanovka s uskoritelem elektronov IYAI NAN Ukrainy»], Atomic Energy [Atomnaya energiya], Vol. 94 (2), pp. 163–165.
- [8] Vyshnevskyy, I.M., Sakhno, V.I., Sakhno, O.V., Zelinskyy, A.G., Tomchay, S.P., Khrin, T.V., Khalova, N.V. (2007), «Specialized stand for functional testing of NPP cables products» [«Spetsializovannyi stend dlya funktsional'nykh vyprobuvan' kabel'nykh vyrobiv AES»], Nuclear Physics and Atomic Energy [Yaderna fizyka ta enerhetyka], No. 1 (19), pp. 140–144.
- [9] Vyshnevskyy, I.M., Sakhno, V.I., Sakhno, O.V., Zelinskyy, A.G., Tomchay, S.P., Khrin, T.V. (2007), «Problems of radiation tests for NPP's cables at the institute for nuclear research elaboration» [«Problemy radiatsiynykh vyprovovuvan' kabeliv AES na ustanovtsi IYAD»], Voprosy atomnoy nauki i tekhniki, No. 6, pp. 128–130.
- [10] «The work program for the qualification of the equipment of NPP SE «NNEGC» «Energoatom» [«Programma robot po kvalifikatsii oborudovaniya energoblokov AES GP «NAEK» «Energoatom»]: PM-D.0.03.476-09, NNEGC, Kiev, 56 p.
- [11] «Basic sanitary rules for radiation safety of Ukraine» [«Osnovni sanitarni pravyla zabezpechennya radiatsiynoyi bezpeky Ukrayiny»]: SSR 6.177-2005-09-02, Kiev, 84 p.
- [12] Husev, N.H. (1990), «Radiation protection of nuclear technology installations. The second volume» [«Zashchita ot izlucheniya yadernykh tekhnicheskikh ustanovok»], Energoatomizdat, Moskva, 351 p.
- [13] Sakhno, V.I. (2004), «Problems of anti-radiation protection optimization of industrial radiation technological plants» [«Problemy optymizatsiyi protyradiatsiynoho zakhystu promyslovykh radiatsiynykh tekhnologichnykh ustanovok»], NPC KhPTI, Kharkiv, pp. 286–287.
- [14] Bulatov, B.P. (1971), «Backscattered gamma radiation in radiation engineering» [«Obratno rasseyannoye gamma-izlucheniye v radiatsionnoy tekhnike»], Atomizdat, Moskva, 239 p.
- [15] Amusia, M.Ya. (1990), «Bremsstrahlung» [«Tormoznoye izlucheniye»], Energoatomizdat, Moskva, 208 p.

- [16] Zhuchko, V.E., Tsypeniuk, Yu.B. (1975), «Calculation of the bremsstrahlung spectra at different angles in the energy range 1-30 MeV» [«Raschet spektrov tormoznogo izlucheniya pod razlichnymi uglami v diapazone energiy 1-30 MeV»], Atomic Energy [Atomnaya energiya], No. 39 (1), p. 66–68.
- [17] Starodubtsev, S.V., Romanov, A.M. (1964), «The interaction of gamma radiation with a substance» [«Vzaimodeystviye gamma-izlucheniya s veshchestvom»], Nauka, Tashkent, 67 p.
- [18] Vyshnevskiy, I.M., Sakhno, V.I., Sakhno, O.V., Zelinskyy, A.G., Tomchay, S.P., Khrin, T.V., Khalova, N.V. (2007), «The research of the scattered radiation of electrons linear accelerator» [«Doslidzhennya rozsiyanoho vyprominyuvannya liniynoho pryskoryuvacha elektroniv»], Nuclear Physics and Atomic Energy [Yaderna fizyka ta enerhetyka], No. 2 (20), pp. 126–130.

©Ужгородський національний університет

УДК 539.184.2, 539.186.3, 539.186.22
PACS 03.67.-a, 34.20.Cf, 42.50.Ex
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.73-84

V.Yu. Lazur, S.I. Myhalyna, O.K. Reity, V.V. Rubish, M.I. Karbovanets

Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, 54, Voloshin Str., Ukraine,
 e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

MATRIX ELEMENTS OF THE DIPOLE-DIPOLE INTERACTION BETWEEN TWO TWO-LEVEL ATOMS DISTANCED ARBITRARILY FROM EACH OTHER

Purpose. As a standard model for describing the processes of a resonant transmission of quantum information on arbitrary distances is the system of two identical two-level atoms, one of which is under radiation of the field of real photons. Such a system can serve as a basis for the construction of an element basis of quantum computers. The purpose of this paper is to study the different modes of dynamics of a system of two identical two-level atoms when they interact with the field of real photons.

Methods. In this paper, we propose a general approach to the description of the processes for the transfer of quantum information from one atom-qubit to another on the arbitrary interatomic distances, which includes two types of new physical effects: the attenuation of quantum states and the retardation of the dipole-dipole interaction.

Results. The optical properties of a system of two identical two-level atoms in collective (symmetric Ψ_s and anti-symmetric Ψ_a) Bell states at arbitrary interatomic distances are investigated. The closed analytical expressions for the shifts and widths of the considered collective states are considered, taking into account the retarded dipole-dipole interaction of atoms. In calculation of the radial matrix elements of the dipole-dipole interaction, the wave functions of the model Fues potential are used.

Conclusions. A detailed study of the mechanisms of resonant transmission of the excitation energy at arbitrary distances between the two-element atoms has an important practical significance for the physical realization of the logical operator CNOT.

Keywords: quantum computer, dipole-dipole interaction, effects of retardation, Fues potential.

Introduction

Search for physical processes performing logical operations is one of the main physical problems associated with the implementation of the idea of the quantum computer and quantum computing [1]. In the papers [2–4], the quantum computer based on electric dipole transitions in a spectrum of two-level atoms interacting selectively with short intensive optical pulses was proposed. As a standard model for describing the processes of a resonant transmission of quantum information at arbitrary distances is the system of two identical two-level atoms, one of which is under radiation of the

field of real photons. Study of various regimes of dynamics of such a model system interacting with the field of real photons can serve as a basis for the construction of an element basis of quantum computers. The theoretically elegant proof of principle possibility of quantum information transmission from one two-level atom to another was given by A.S. Davidov [5], and also by O.N. Gadomsky and K.K. Altunin in aforementioned paper [2].

The problem of two interacting electrons belonging to two different atoms being arbitrarily apart from each other is one of key problems in understanding the processes of resonant transmission of quantum information at arbitrary

trary distances. A large number of papers (see [2, 6–15] and references therein) are devoted to its study. The main result of these works is that the presence of the second atom can significantly change the lifetime of the excited state of the atom; this change in the lifetime depends on the mutual orientation of the dipole moments of the transition of the atoms and distance between them. Despite existing numerous publications on the resonance interaction of atoms, many aspects of this interaction remain weakly investigated up to this day, especially for two neutral atoms located at an arbitrary distance from each other.

Operator of electric dipole-dipole interaction of two neutral atoms located at an arbitrary distance from each other

The resonance interaction occurs between the excited atom and the atom in the ground state, if the transition energy to the excited state is the same for both atoms (the atoms are in resonance). A similar situation always takes place in the interaction of two identical two-level atoms.

There are several reasons why the theory of resonant interaction of atoms at arbitrary distances from each other deserves further development. First of all, in order to realise experimentally two-qubit quantum operations with cold neutral atoms it is necessary to be able to control the interaction between the qubits [16]. That is why thorough theoretical study of all possible types of atomic interactions is a key to creating a quantum computer with qubits on neutral atoms in optical traps. Depending on the specific quantum states of the atoms involved in the process of quantum information transmission in the system of two qubits, this may be either the Van der Waals interaction or the resonant dipole-dipole interaction each of what is characterized by different dependence on the

interatomic distance R (R^{-6} and R^{-3} respectively, when neglecting the retardation). The dipole-dipole interaction of atoms is stronger in large (relatively to their own sizes) distances, and therefore its use is a priority for increasing the accuracy of quantum operations with neutral atoms.

However, the standard quantum-mechanical calculation of the energy of the resonance interaction of two identical atoms (see, for example, [5]) becomes unsuitable for too large distances of R between them. The fact is that this calculation takes into account only the instantaneous Coulomb interaction of charges (the term $\sim 1/R^3$ in the interaction operator (2) without the retardation factor $\exp(i|\omega_{fi}|R/c)$). Such a consideration is only valid until the interatomic distance R remains small compared with the characteristic wavelengths λ_0 in the spectra of the interacting atoms.

A consistent theory of resonance interaction of atoms that correctly describes the behavior of the forces of the dipole interaction of atoms on both near and far distances can be constructed only if in this theory, all types of atomic electrons interaction that are manifested in different spatial scales are taken into account from the outset. Therefore, in describing the resonance interaction of atoms at arbitrary distances from each other, along with the instantaneous Coulomb interaction, it is necessary to take into account also the retarded interaction of atoms, which depends on the velocity of light c and disappears at $c \rightarrow \infty$.

Such a general consideration was made in [6, 8–11], where the operator $\hat{V}_{LL}^{(\pm)}$ of the retarded interaction of two electrons belonging to two different hydrogen-like atoms at an arbitrary distance from each other. It is convenient to write both parts of the inter-electron interaction operator constructed in [6, 8–11] i.e. the retarded part $\hat{V}_{LL}^{(\pm)}$ and the Coulomb part V_C in the following form:

$$\hat{V}^{(\pm)} = \hat{V}_C + \hat{V}_{LL}^{(\pm)} = \exp\left(\frac{i}{c}|\omega_{fi}^{(1)}|R\right) \left\{ \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{2m^2c^2} \left[\frac{\hat{p}_1\hat{p}_2 + \vec{n}(\vec{n}\hat{p}_1)\hat{p}_2}{r_{12}} + R^2 \frac{\hat{p}_1\hat{p}_2 - 3\vec{n}(\vec{n}\hat{p}_1)\hat{p}_2}{r_{12}^3} \right] \pm \frac{e^2 R}{2mc} \frac{\vec{n}\hat{p}_1 + \vec{n}\hat{p}_2}{r_{12}^2} \right\}. \quad (1)$$

Here c is the velocity of light, $e = -|e|$ and m are the charge and mass of an electron, $r_{12} = |\vec{r}'_1 - \vec{r}'_2|$ is the distance between electrons belonging to atom 1 and atom 2, $\vec{n} = (\vec{r}'_1 - \vec{r}'_2)/r_{12}$, $\vec{r}'_1$ and $\vec{r}'_2$ are the radius-vectors of electrons 1 and 2 in an arbitrary coordinate system, $\hat{p}_1$ and $\hat{p}_2$ are the momentum operators of 1-st and 2-nd atomic electrons respectively. In (1) and thereafter, subscripts 1 and 2 differ quantities connected with two different atoms; subscripts i and f characterize the initial and final states of interacting electrons; $|\omega_{fi}^{(j)}| = |\omega_f^{(j)} - \omega_i^{(j)}| \equiv \omega_0$ is the resonant frequency of transition in the spectrum of two-level atoms; $\omega_i^{(j)}$ and $\omega_f^{(j)}$ are the frequencies of initial and final states of j -th electron. In (1), the plus sign in front of the term containing the factor R corresponds to the case $\omega_f^{(1)} > \omega_i^{(1)}$, and the minus sign corresponds to the case $\omega_f^{(1)} < \omega_i^{(1)}$. Oscillating exponential factor (so-called retardation factor) $\exp(i\omega_0 R/c)$ determines the role of time retar-

ation of considered type of atoms interaction [18].

Let the interatomic axis $\vec{R}$ of the diatomic quantum system be directed along the z axis. We will assume further that one two-level atom is at the origin of the coordinate system ($\vec{R}_1 = 0$) and the other at the point $\vec{R}_2$ with coordinates $(0, 0, R)$. At large distances R , the operator $\hat{V}^{\pm}$ describing the interaction between atoms can be regarded as a small perturbation. Consequently, we can relatively easily estimate the energy of the resonance excitation exchange between two atoms distanced from each other on the basis of the usual perturbation theory. As follows from the derivation (see, for example, [8, 10]) of the formula (1), the operator $\hat{V}^{(\pm)}$ takes into account the transitions in the spectrum of atoms of arbitrary multiplicity. In this paper, we restrict ourselves to considering only electric dipole transitions for which the operator $\hat{V}^{(\pm)}$ is written as:

$$\hat{V}_{dip}^{(\pm)} = \exp\left(\frac{i}{c}\omega_0 R\right) \left\{ \frac{\vec{d}_1\vec{d}_2 - 3(\vec{n}_R\vec{d}_1)(\vec{n}_R\vec{d}_2)}{R^3} \pm \frac{e}{2mc} \left[\frac{\vec{d}_1\hat{p}_2 - 3(\vec{n}_R\vec{d}_1)(\vec{n}_R\hat{p}_2)}{R^2} - \frac{\hat{p}_1\vec{d}_2 - 3(\vec{n}_R\hat{p}_1)(\vec{n}_R\vec{d}_2)}{R^2} \right] - \frac{e^2}{m^2c^2} \frac{\hat{p}_1\hat{p}_2 - (\vec{n}_R\hat{p}_1)(\vec{n}_R\hat{p}_2)}{R} \right\}, \quad (2)$$

where $\vec{n}_R = \vec{R}/R$ is the unit vector in the direction of the inter-atomic axis $\vec{R}$, $\omega_0 \equiv \omega_{n0} = (E_n - E_0)/\hbar$ is the resonance frequency in the spectrum of two-level atoms, $\vec{d}_1 = e\vec{r}_1$ and $\vec{d}_2 = e\vec{r}_2$ are the operators of the electric dipole moments of separate atoms, $\vec{r}_1$ and $\vec{r}_2$ are the radius-vectors of electrons 1 and 2 relatively nuclei of atoms $A(1)$ and $A(2)$, respectively. This operator is known as the generalized operator of electric dipole-dipole interaction of two neutral atoms located at an arbitrary distance from each other.

The energy of resonance interaction of atoms at arbitrary distances

Let us consider the system of two identical atoms at an arbitrary distance R from each other. In each atom, we will be interested in the transition between the same pair of levels, and the other levels will not manifest themselves in the considered process of resonant transfer of the excitation energy from one atom to another. In fact, in nature, there are practically no atomic systems with only two energy levels. But if

the interaction with the field is of pronounced resonant character, then, as a rule, the influence of other levels can be neglected. Thus, the two-level atom represents a certain mathematical model of qubit – a carrier of quantum information. The existence in the atomic quantum system of two selected internal basis states and the principle of superposition is enough to store one bit of quantum information – a qubit. We characterize each atom-qubit with two levels of energy E_0 and E_n having the resonant transition frequency $\omega_0 = \omega_{fi}^{(1)} = -\omega_{fi}^{(2)} = (E_n - E_0)/\hbar$ and the wave functions $\varphi_0(j)$ and $\varphi_n(j)$. The subscripts 0 and n denote the ground and excited states of the atom, respectively, and the argument $j = (1, 2)$ of the wave function indicates a number of the electron (and a number of the atom) to which it belongs.

Classical computers operate with bistable transistor circuits that have a nonlinear relationship between the input and output voltages [1]. In a quantum computer, a role of such a bistable transistor circuit plays a two-level atom having two orthogonal states $|0\rangle$ and $|n\rangle$, between which an electric single-electron dipole transition with a resonant frequency ω_0 is allowed. Let the state $|0\rangle$ with the wave function $\varphi_0(j)$ and the energy E_0 be a logical “0” $\equiv |0\rangle$ and the state $|n\rangle$ with the wave function $\varphi_n(j)$ and the energy E_n ($E_n > E_0$) be a logical “1” $\equiv |n\rangle$. The level-to-level dipole transitions $|0\rangle \leftrightarrow |n\rangle$, $E_0 \leftrightarrow E_n$ with the matrix element of the dipole moment of atom transition $(\vec{d}_j)_{n0} = \langle n|\vec{d}_j|0\rangle$ correspond to the transitions “0” $\leftrightarrow$ “1”. As noted in [1], a quantum bistable element (qubit) has a new (compared with the classical one) property of the superposition of states: it can be in any superposition state $|\varphi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|n\rangle$, where α and β are complex numbers satisfying the condition $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. It is the quantum principle of states superposi-

tion that allows the quantum computer to provide fundamentally new possibilities.

For the system of two interacting atoms having only one electron, the Hamiltonian $\hat{H}$ can be represented in the form of sum of Hamiltonians of isolated atoms, $\hat{H}_0 = \hat{H}_1(\vec{r}_1) + \hat{H}_2(\vec{r}_2)$, and operator of electric dipole-dipole interaction between them, $\hat{V}_{dip}^{(\pm)}$:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V}_{dip}^{(\pm)} \\ &= \hat{H}_1(\vec{r}_1) + \hat{H}_2(\vec{r}_2) + \hat{V}_{dip}^{(\pm)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R).\end{aligned}\quad (3)$$

Let $E_{n_1 n_2} = E_{n_1} + E_{n_2}$ and $|n_1 n_2\rangle$ are respectively the eigenvalue and eigenfunction of operator of energy $\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ without interatomic interaction. In accordance with the partition (3), let us denote the wave function of the state of the system in which both the non-interacting atoms are in the ground state by $|00\rangle$, that is,

$$\begin{aligned}|00\rangle &= \varphi_0(1)\varphi_0(2) \exp(-iE_0 t_1/\hbar) \\ &\times \exp(-iE_0 t_2/\hbar) \equiv \tilde{\varphi}_0(1)\tilde{\varphi}_0(2).\end{aligned}\quad (4)$$

Here E_0 is the energy of the initial states of the first $A(1)$ and second $A(2)$ atoms, the numbers 1 and 2 correspond to the coordinates and times for the atoms $A(1)$ and $A(2)$, respectively. For neutral atoms having not constant dipole moments, the energy correction to the two-atom system is equal to zero, because $\langle 00|\hat{V}_{dip}^{(\pm)}|00\rangle = 0$. At the same time, the dipole-dipole interaction being effective at small distances between atoms distorts in some way the wave functions of atomic states. Thus, in the first approximation of the perturbation theory in the interatomic interaction $\hat{V}_{dip}^{(\pm)}$ (2), the perturbed wave function of the system of two identical atoms in the ground state is of the standard form (see, for example, [5, 17]):

$$\Psi_0(1)\Psi_0(2) = \tilde{\varphi}_0(1)\tilde{\varphi}_0(2) + \sum_{n_1 n_2} \frac{\langle \tilde{\varphi}_{n_1}(1)\tilde{\varphi}_{n_2}(2)|\hat{V}_{dip}^{(\pm)}|\tilde{\varphi}_0(1)\tilde{\varphi}_0(2) \rangle}{2E_0 - E_{n_1} - E_{n_2}} \tilde{\varphi}_{n_1}(1)\tilde{\varphi}_{n_2}(2), \quad (5)$$

where summation is carried out with respect to all possible intermediate states of atoms except of $|00\rangle$. According to the representation (5),

a non-zero correction to the energy of the two neutral atoms system in the ground state will appear only in the second order of the pertur-

bation theory [5, 17, 18]. We consider the state $\Psi_0(1)\Psi_0(2)$ (see (5)) as an initial state of pair of atoms interacting with field of real photons.

Let the final state $|n0\rangle$ of two resonant atoms corresponds to the excited state $|n\rangle$ of atom $A(1)$ with wave function $\tilde{\varphi}_n(1) = \varphi_n(1) \exp(-iE_n t_1/\hbar)$ and energy E_n as well as the ground state $|0\rangle$ of atom $A(2)$ with wave function $\tilde{\varphi}_0(2) = \varphi_0(2) \exp(-iE_0 t_2/\hbar)$ and energy E_0 . According to the resonance condition, the state $|0n\rangle$ being described by the wave function $\tilde{\varphi}_0(1)\tilde{\varphi}_n(2)$ corresponds to the same energy. Consequently, the unperturbed system (two isolated identical atoms) has the additional degeneration here associated with the possibility of permutation of states between atoms. In the first approximation of the perturbation theory, we have the energy matrix of the second order. It is diagonalized when constructing symmetric and antisymmetric linear combinations of the initial wave functions of individual atoms:

$$\Phi_s(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\tilde{\varphi}_n(1)\tilde{\varphi}_0(2) + \tilde{\varphi}_0(1)\tilde{\varphi}_n(2)], \quad (6)$$

$$\Phi_a(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\tilde{\varphi}_n(1)\tilde{\varphi}_0(2) - \tilde{\varphi}_0(1)\tilde{\varphi}_n(2)]. \quad (7)$$

In the case of complex atoms $A(1)$ and $A(2)$ with an arbitrary number of electrons, the interaction between them at small distances R plays a significant role. In this, the Hamiltonians $\hat{H}_1$ and $\hat{H}_2$ as well as the zeroth approximation functions Φ_s (6) and Φ_a (7) should be interpreted in the approximation of the self-consistent field for the two-center potential [19]. In this case, $\hat{V}_{dip}^\pm$ is the correlation interaction of atoms with each other. The transition to the corresponding operator of the electric dipole-dipole interaction $\hat{V}_{dip}^\pm$ of atoms with many electrons can be carried out by transition in (2) from the momentum operator $\vec{v}ecp_j$ of j -th electron to the operator of the dipole moment $\vec{d}_j$ [5] and the subsequent replacement of the operators $\vec{d}_1$ and $\vec{d}_2$ by the operators of the dipole moments of the atoms $A(1)$ and $A(2)$, respectively.

In order to obtain corrections to the energy of symmetrical (6) and antisymmetrical (7) states of the system of two resonant atoms in the first order of perturbation theory one has to cal-

culate the mean values of the perturbation operator $\hat{V}_{dip}^{(\pm)}$ (2) in these states, i.e.,

$$\begin{aligned} \Delta E_s &= \langle \Phi_s | \hat{V}_{dip}^{(\pm)} | \Phi_s \rangle, \\ \Delta E_a &= \langle \Phi_a | \hat{V}_{dip}^{(\pm)} | \Phi_a \rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

Substituting the expressions (2), (6) and (7) into (8), after simple transformations with use of the known ratio [5]

$$\langle n | \hat{p}_j | 0 \rangle = i \frac{m\omega_0}{e} \langle n | \vec{d}_j | 0 \rangle$$

we obtain the final expression

$$\begin{aligned} \Delta E_s(R) &= -\Delta E_a(R) = \omega_0^3 e^{i\omega_0 R/c} |\langle n | \vec{d} | 0 \rangle|^2 \\ &\times \left[\left(\frac{1}{\omega_0^3 R^3} - \frac{i}{c\omega_0^2 R^2} \right) \Phi(1, 2) - \frac{\Phi'(1, 2)}{c^2 \omega_0 R} \right] \\ &\equiv \Delta E_{AA}(R). \end{aligned} \quad (9)$$

Here

$$\begin{aligned} \Phi(1, 2) &\equiv \cos \theta_1^x \cos \theta_2^x + \cos \theta_1^y \cos \theta_2^y \\ &\quad - 2 \cos \theta_1^z \cos \theta_2^z, \\ \Phi'(1, 2) &\equiv \cos \theta_1^x \cos \theta_2^x + \cos \theta_1^y \cos \theta_2^y \end{aligned}$$

are the geometric factors depending on the orientation of dipole transitions in both atoms, θ_i^x , θ_i^y , θ_i^z ($i = 1, 2$) are the angles between one of corresponding axes and the direction of dipole transition in i -th atom $A(i)$. When writing the expression (9) it is taken into account that the atom-qubits of the considered quantum system are identical, that is, they have identical matrix elements of the operator of the dipole moment between the ground $|0\rangle$ and excited $|n\rangle$ states:

$$|\langle n | \vec{d}_1 | 0 \rangle| = |\langle n | \vec{d}_2 | 0 \rangle| = |\langle n | \vec{d} | 0 \rangle| \equiv |\langle \vec{d} \rangle_{n0}|.$$

Note that the quantity ΔE_s (ΔE_a) is complex shift of energy E_s (E_a) of symmetrical (antisymmetrical) state Φ_s (Φ_a) of the pair of identical atoms. For further analysis, in the formulas (9) for ΔE_s and ΔE_a , it is convenient to separate explicitly real and imaginary parts:

$$\Delta E_s = \delta E_s - \frac{i}{2} \hbar \gamma_s, \quad \Delta E_a = \delta E_a - \frac{i}{2} \hbar \gamma_a. \quad (10)$$

The complexity of the shifts ΔE_s and ΔE_a reflects in the first place purely relativistic effects of retardation of the interaction (1) of two resonant atoms at an arbitrary distance from each other. The appearance of imaginary terms

$-i\hbar\gamma_s/2$ and $-i\hbar\gamma_a/2$ in $\Delta E_{s(a)}$ (10) arising from the retarded dipole-dipole interaction of atoms, was first revealed in [20], and later, independently in the more systematic approach [14].

The first-order corrections to the energy $E_n + E_0$ of initially degenerated collective states (6) and (7) give only real parts δE_s and δE_a of the complex shifts (8):

$$\begin{aligned}\delta E_{s,a}(R) &= \pm \text{Re} \Delta E_{AA}(R) \\ &= \pm e^2 |\langle n | \vec{r} | 0 \rangle|^2 F(1, 2; R). \quad (11)\end{aligned}$$

The dependence of the shifts $\delta E_{s(a)}(R)$ on the interatomic distance R is completely determined by the multiplier $F(1, 2; R)$. In order to simplify the expression (11), there is the notation used:

$$\begin{aligned}F(1, 2; R) &= \\ &= \left[\frac{\Phi(1, 2)}{R^3} - \frac{\omega_0^2 \Phi'(1, 2)}{c^2 R} \right] \cos \left(\frac{\omega_0 R}{c} \right) \\ &+ \frac{\omega_0 \Phi(1, 2)}{c R^2} \sin \left(\frac{\omega_0 R}{c} \right), \quad (12)\end{aligned}$$

where the plus and minus signs in (11) correspond to the symmetric Φ_s and the antisymmetric Φ_a wave functions of the pair of identical atoms. As can be seen in (11), for the states of different symmetries (Φ_s (6) and Φ_a (7)) with respect to permutations of atoms, the considered retarded dipole-dipole interaction gives the shifts δE_s and δE_a having opposite signs: $\delta E_s = -\delta E_a$. At the same time, with increasing R moduli of the shifts $\delta E_{s(a)}$ of energy levels of the system of dipole-dipole interacting atoms decrease and tend to zero in the limit of separated ($R \rightarrow \infty$) atoms as $1/R$.

Let us study the behavior of $\delta E_{s(a)}(R)$ in the limiting cases of large and small R . Thus, the expressions for δE_s and δE_a can be essentially simplified at $\omega_0 R/c \rightarrow 0$, when linear sizes of two-atom quantum system are much smaller than characteristic wave length $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$ in spectrum of interacting atoms ($R \ll \lambda_0$). In this limiting case, one can neglect the retardation of the dipole-dipole interaction of atoms, that makes it possible to substitute $\cos(\omega_0 R/c) = 1$, $\sin(\omega_0 R/c) = \omega_0 R/c$ in the expression (12) for $F(1, 2; R)$ and to omit terms proportional to $1/R$ and $1/R^2$. Then, instead of

(11) we obtain

$$\delta E'_{s,a} = \pm \frac{e^2}{R^3} |\langle n | \vec{r} | 0 \rangle|^2 \Phi(1, 2). \quad (13)$$

As it is expected, this expression coincides with the known formula [5] for the energy of resonant exchange of excitations between two neutral atoms located closely from each other.

We now consider the opposite limiting case $\omega_0 R/c \gg 1$, when the distance between atoms is much larger than the wavelength $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$. As can be seen from (1) and (2), only the mostly long-range retardation term, proportional to $1/R$, plays the main role in the interaction between atoms (when $R \gg \lambda_0$). For this reason, in the formula (12) for the factor $F(1, 2; R)$, terms decreasing with the distance as $1/R^2$ and $1/R^3$ can be neglected. As a result, for sufficiently large R ($R \geq 0$), the expression (11) got the following form:

$$\begin{aligned}\delta E_s &= -\delta E_a = \\ &= -\frac{e^2 \omega_0^2 \Phi'(1, 2)}{c^2 R} |\langle n | \vec{r} | 0 \rangle|^2 \cos \left(\frac{\omega_0 R}{c} \right). \quad (14)\end{aligned}$$

This expression is consistent with the corresponding formula [20] for the energy of the resonance excitation exchange between two distant ($R \gg \lambda_0$) neutral atoms.

Let us take note of the following important circumstance related to the difference between formulas (11) and (13). The presence of the real $\cos(\omega_0 R/c)$ and imaginary $\sin(\omega_0 R/c)$ parts of the retardation factor $\exp(i\omega_0 R/c)$ in various terms of the expression (12) indicates to the complicated periodic dependence of the matrix element of the excitation transfer $\delta E_{s(a)}(R)$ on the interatomic distance R . It is this property of the oscillating behavior of $\delta E_{s,a}(R)$ on the background of power decreasing ($\sim 1/R$) with the distance R being slower than (13) is the most characteristic feature of the formula (11) for the energy of the resonant excitation exchange between two neutral atoms. The dependence of $\delta E_{s,a}(R)$ on R distinguishes from (13) due to the retardation part of the dipole-dipole interaction of atoms.

Therefore, we see that at account of dipole-dipole interatomic interaction (2) the symmetrical and antisymmetrical states of the

pair of atoms have the different energies

$$\begin{aligned} E_s &= E_n + E_0 + \delta E_s \\ &= E_n + E_0 + e^2 |\langle n | \vec{r} | 0 \rangle|^2 F(1, 2; R), \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} E_a &= E_n + E_0 + \delta E_a \\ &= E_n + E_0 - e^2 |\langle n | \vec{r} | 0 \rangle|^2 F(1, 2; R). \end{aligned} \quad (16)$$

Two collective states of the system of two resonant atoms: symmetric s and antisymmetric a , initially degenerated with respect to energy, are described by the two types of wave functions Φ_s (6) and Φ_a (7) which with taking into account the corrections $\delta E_s, \delta E_a$ to the energy $E_n + E_0$ can be written as

$$\begin{aligned} \Psi_s &= \Phi_s \exp(-i\delta E_s t_1 / \hbar), \\ \Psi_a &= \Phi_a \exp(-i\delta E_a t_1 / \hbar), \end{aligned} \quad (17)$$

where Φ_s and Φ_a are determined in (6) and (7), t_1 is the local time for the atomic pair associated with the position of the atom $A(1)$.

As can be seen from (15) and (16), the dipole-dipole interaction between atoms leads to the splitting of the initially degenerate (with respect to the energy) level $E_0 + E_n$ into two collective energy levels E_s (15) and E_a (16) distanced from each other by the quantity $\Delta E = E_s - E_a = 2\delta E_s$, which characterizes the process of resonance transfer of the excitation energy from one atom to another. At the same time, due to the resonance interaction of atoms, the energy level E_s (15) lies $\Delta E = 2\delta E_s$ above the level E_a (16).

Thus, in order to calculate the energy of symmetric E_s (15) and antisymmetric E_a (16) states of the system of two resonant atoms, it is necessary to calculate the matrix elements of the dipole transitions $\langle n | \vec{r} | 0 \rangle$. In this case, the wave function should take into account the influence of the electrons of the atomic core on the non-Coulomb additive to the potential acting on the valence electron in the atom.

Such a modification is present, for example, in the Fues model potential, which takes into account simultaneously action of the polarization potential on states with large orbital quantum numbers l and the action of the Pauli principle that “forces out” a valence electron from the core in states with small l [21]. The Fues potential for the motion of an electron in the field of an ion residue with the charge Z_i has the form

$$V(r) = -\frac{Z_i}{r} + \sum_l \frac{B_l(E)}{r^2} \hat{P}_l, \quad (18)$$

where $\hat{P}_l$ is the projection operator on the subspace of states with the orbital moment l , $B_l(E)$ is the constant that changes the centrifugal potential in this subspace in such a way that the eigenvalues $E_{nl} = -Z^2/(2\nu_{nl}^2)$ of the corresponding radial Schrödinger equation, which are determined by the effective principal quantum number [21, 22]

$$\begin{aligned} \nu_{nl} &= n_r + \lambda_{nl} + 1, \\ \lambda_{nl} &= \sqrt{(l + 1/2)^2 + 2B_l(E_{nl})} - 1/2 \end{aligned} \quad (19)$$

(λ is the effective orbital moment, $n_r = 0, 1, 2, \dots$ is the radial quantum number), coincide exactly with energies of a real atom.

The eigenfunctions of the radial Hamiltonian with the potential (18) normalized by the condition

$$\int_0^\infty |\langle r | nlj \rangle|^2 r^2 dr = 1$$

can be written using the confluent hypergeometric function ${}_1F_1(a; c; x)$ in the form

$$\langle r | nlj \rangle = \frac{2Z_i^{3/2}}{\nu_{nl}^2} \sqrt{\frac{(2\lambda + 2)_{n_r}}{n_r! \Gamma(2\lambda + 2)}} \left(\frac{2Z_i r}{\nu_{nl}} \right)^\lambda \exp\left(-\frac{Z_i r}{\nu_{nl}}\right) {}_1F_1\left(-n_r; 2\lambda + 2; \frac{2Z_i r}{\nu_{nl}}\right); \quad (20)$$

Here, the standard notations for the gamma function $\Gamma(x)$ and the Pochhammer symbol $(a)_n = a \cdot (a+1) \cdot \dots \cdot (a+n-1)$ [23] are used. It is obvious that this solution satisfies the standard requirements of continuity, uniqueness and boundedness in the entire numerical semiaxis,

which represents the distance from the atomic nucleus to electron $r \in [0; \infty)$. Therefore, after integrating, the radial matrix element $R_{nn'}$ in (15) and (16) can be represented analytically using the generalized hypergeometric function of two variables F_2 [23, 24]:

$$R_{nn'} = \frac{1}{4Z_i} \frac{\Gamma(\lambda + \lambda' + 4)}{\sqrt{\Gamma(2\lambda + 2)\Gamma(2\lambda' + 2)}} \sqrt{\frac{(2\lambda + 2)_{n_r}}{n_r!} \frac{(2\lambda' + 2)_{n_r'}}{n_r'!}} \left(\frac{2\nu}{\nu + \nu'}\right)^{\lambda_l + 2} \left(\frac{2\nu'}{\nu + \nu'}\right)^{\lambda_l + 2} \times \\ \times F_2\left(\lambda + \lambda' + 4; -n_r; -n_r'; 2\lambda + 2; 2\lambda' + 2; \frac{2\nu'}{\nu + \nu'}, \frac{2\nu}{\nu + \nu'}\right), \quad (21)$$

where the primed quantities refer to the final state, and non-primed ones – to the initial state.

Summary

In this paper, on the basis of the theory of resonance interaction of atoms through the field of virtual photons [6, 8–11], the influence of the retarded dipole-dipole interaction of atoms on the formation and decay of quasi-stationary collective (symmetric Ψ_s and antisymmetric Ψ_a) states of the quantum system consisting of two

fixed identical two-level atoms is investigated. The closed analytic expressions for the shifts and widths of the considered collective states Ψ_s and Ψ_a are obtained taking into account the retarded dipole-dipole interaction of atoms. The theoretical analysis of the shift and splitting of the collective energy levels of the given system caused by interatomic interaction is carried out. The asymptotic expansions of the real and imaginary parts of energy of the quasi-stationary Bell states Ψ_s and Ψ_a in the limit of large and small interatomic distances are studied.

REFERENCES

- [1] Valiev, K.A. (2005), «Quantum computers and quantum computations», *Phys. Usp.*, V. 48, No. 1, pp. 1–36.
- [2] Gadomsky, O.N., Altunin, K.K. (2000), «Quantum teleportation and resonant transfer of information from one atom to another at arbitrary interatomic distances» [«Kvantovaya teleportatsiya i rezonansnaya peredacha informatsii ot odnogo atoma k drugomu pri proizvol'nykh mezhatomnykh rasstoyaniyakh»], *Russian Physics Journal [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Fizika]*, V. 11, pp. 3–8.
- [3] Gadomsky, O.N., Voronov, Yu.Yu. (2002), «On a physical implementation of logical operators NOT and CNOT in a two-qubit quantum computer controlled by ultrashort optical pulses», *J. Exp. Theor. Phys.*, V. 94, Iss. 5, pp. 882–891.
- [4] Gadomskii, O.N., Kharitonov, Y.Y. (2004), «Quantum computer based on activated dielectric nanoparticles selectively interacting with short optical pulses», *Quantum Electronics*, V. 34, Iss. 3, pp. 249–254.
- [5] Davydov, A.S. (1976), *Quantum Mechanics*, 2nd Ed., Pergamon Press, Oxford, 704 p.
- [6] Lazur, V.Yu., Migalina, S.I., Reiti, A.K. (2009), «The quantum electrodynamic problem of two electrons», *Theoret. and Math. Phys.*, V. 158, Iss. 3, pp. 333–343.
- [7] Gadomskii, O.N. (2000), «Two electron problem and the nonlocal equations of electrodynamics», *Phys. Usp.* V. 43, No. 11, pp. 1071–1102.
- [8] Lazur, V.Yu., Myhalyna, S.I., Reity, O.K. (2010), «Interaction of two quasimolecular electrons via the field of virtual photons as a second-order effect of quantum electrodynamics», *Phys. Rev. A.*, V. 81, Iss. 6, pp. 062707(1–10).

- [9] Lazur, V.Yu., Reity, O.K., Pavlyk, O.F. (2010), «The generalized Breit operator of the interaction between two quasimolecular electrons in the framework of the third-order effects of quantum electrodynamics», *Journal of Physics A.*, V. 43, No. 17, pp. 175208(1–16).
- [10] Lazur, V.Yu., Pavlyk, O.F., Reity, O.K. (2010), «The relativistic operator of interaction of two quasimolecular electrons as a third-order effect of quantum electrodynamics», *Theoret. and Math. Phys.*, V. 165, Iss. 1, pp. 1293–1314.
- [11] Lazur, V.Yu., Myhalyna, S.I., Reity, O.K. (2010), «The generalized Breit operator of a long-range type in the framework of the second-order effects of quantum electrodynamics», *Int. J. of Mod. Phys. A.*, V. 25, No. 25, pp. 4775–4800.
- [12] Gadomskii, O.N., Nagibarov, V.R., Solovarov, N.K. (1973), «Theory of Radiation from a System of Weakly Interacting Particles», *Sov. Phys. JETP*, V. 36, No. 3, pp. 426–429.
- [13] Gadomskii, O.N., Nagibarov, V.R., Solovarov, N.K. (1976), «Relativistic effects in superradiance processes», *Sov. Phys. JETP*, V. 43, No. 2, pp. 225–230.
- [14] Chang, C.S., Stehle, P. (1971), «Resonant Interaction between Two Neutral Atoms», *Phys. Rev. A.*, V. 4, Iss. 2, pp. 630–640.
- [15] Gadomsky, O.N., Altunin, K.K. (1998), «The problem of two electrons in an external field and the method of integral equations in optics», *J. Exp. Theor. Phys.*, V. 87, Iss. 5, pp. 842–854.
- [16] Ryabtsev, I.I., Beterov, I.I., Tretyakov, D.B., Entin, V. M., Yakshina. E.A. (2016), «Spectroscopy of cold rubidium Rydberg atoms for applications in quantum information», *Phys. Usp.* V. 59, No. 2, pp. 196–208.
- [17] Landau, L.D., Lifshits, E.M. (1965), *Course of Theoretical Physics. V. 3. Quantum Mechanics – Non-Relativistic Theory*, Pergamon Press, London, 616 p.
- [18] Akhiezer, A.I., Berestetskiy, V.B. (1981), *Quantum Electrodynamics [Kvantovaya elektrodinamika]*, Nauka, Moscow, 428 p.
- [19] Lengyel, V.I., Lazur, V.Yu., Karbovanets, M.I., Yanev, R.K. (1989), *Introduction in Theory of Atomic Collisions [Vvedeniye v teoriyu atomnykh stolknoveniy]*, Vyshcha Shkola, L'vov, 192 p.
- [20] Stephen, M.J. (1964), «First Order Dispersion Forces», *J. Chem. Phys.*, V. 40, Iss. 3, pp. 669–673.
- [21] Simons, G. (1971), «New Model Potential for Pseudopotential Calculations», *J. Chem. Phys.* V. 55, Iss. 2, pp. 756–761.
- [22] Il'inova, E.Y., Ovsyannikov, V.D. (2008), «Modified Fues potential for many-electron atoms», *Optics and Spectroscopy*, V. 105, Iss. 5, pp. 647–656.
- [23] Bateman, H., Erdélyi, A. (1955), *Higher Transcendental Functions (Based on notes left by H. Bateman)*, Vol. 3, McGraw-Hill, New York, 300 p.
- [24] Ovsyannikov, V.D., Glukhov, I.L. (2006), «Lifetime of a Rydberg atom» [«Vremya zhizni ridbergovskogo atoma»], *Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics [Vestnik VGU. Seriya: Fizika. Matematika]*, V. 2, pp. 99–106.

Стаття надійшла до редакції 3.04.2019

В. Ю. Лазур, С. И. Мигалина, А. К. Рейтий, В. В. Рубиш, М. И. Карбованец

Ужгородский национальный университет, 88000 Ужгород, ул. Волошина, 54, Украина,
e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ДВУМЯ ДВУХУРОВНЕВЫМИ АТОМАМИ, РАСПОЛОЖЕННЫМИ НА ПРОИЗВОЛЬНОМ РАССТОЯНИИ ДРУГ ОТ ДРУГА

Исследовано оптические свойства системы из двух одинаковых двухуровневых атомов в коллективных (симметричном Ψ_s и антисимметричного Ψ_a) белловских состояниях при произвольных межатомных расстояниях. Получены замкнутые аналитические выражения для сдвигов и ширин рассматриваемых коллективных состояний с учетом запизнюющей диполь-дипольного взаимодействия атомов. При исчислении радиальных матричных элементов диполь-дипольного взаимодействия использованы волновые функции модельного потенциала Фьюса.

Ключевые слова: квантовый компьютер, диполь-дипольное взаимодействие, эффекты запаздывания, потенциал Фьюса.

В. Ю. Лазур, С. І. Мигалина, О. К. Рейтій, В. В. Рубіш, М. І. Карбованець

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54, Україна,
e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

МАТРИЧНІ ЕЛЕМЕНТИ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ МІЖ ДВОМА ДВОРІВНЕВИМИ АТОМАМИ, РОЗТАШОВАНИМИ НА ДОВІЛЬНІЙ ВІДСТАНІ ОДИН ВІД ОДНОГО

Досліджено оптичні властивості системи з двох однакових дворівневих атомів у колективних (симетричному Ψ_s і антисиметричному Ψ_a) беллівських станах при довільних міжатомних відстанях. Отримано замкнуті аналітичні вирази для зсувів і ширин розглядуваних колективних станів з урахуванням запізнюючої диполь-дипольної взаємодії атомів. При обчисленні радіальних матричних елементів диполь-дипольної взаємодії використано хвильові функції модельного потенціалу Фьюса.

Ключові слова: квантовий комп'ютер, диполь-дипольна взаємодія, ефекти запізнювання, потенціал Фьюса.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Valiev K.A. Quantum computers and quantum computations / K.A. Valiev // Phys. Usp. – 2005. – V. 48, No. 1. – P. 1–36.

- [2] Гадомский О.Н. Квантовая телепортация и резонансная передача информации от одного атома к другому при произвольных межатомных расстояниях / О.Н. Гадомский, К.К. Алтунин // Известия высших учебных заведений. Физика. — 2000. — Вып. 11. — С. 3–8.
- [3] Gadomsky O.N. On a physical implementation of logical operators NOT and CNOT in a two-qubit quantum computer controlled by ultrashort optical pulses / O.N. Gadomsky, Yu.Yu. Voronov // J. Exp. Theor. Phys. — 2002. — V. 94, Iss. 5. — P. 882–891.
- [4] Gadomskii O.N. Quantum computer based on activated dielectric nanoparticles selectively interacting with short optical pulses / O.N. Gadomskii, Yu.Ya. Kharitonov // Quantum Electronics. — 2004. — V. 34, Iss. 3. — P. 249–254.
- [5] Davydov A.S. Quantum Mechanics, 2nd Ed. / A.S. Davydov. — Oxford: Pergamon Press, 1976. — 704 p.
- [6] Lazur V.Yu. The quantum electrodynamic problem of two electrons / V.Yu. Lazur, S.I. Migalina, A.K. Reiti // Theoret. and Math. Phys. — 2009. — V. 158, Iss. 3. — P. 333–343.
- [7] Gadomskii O.N. Two electron problem and the nonlocal equations of electrodynamics / O.N. Gadomskii // Phys. Usp. — 2000. — V. 43, No. 11. — P. 1071–1102.
- [8] Lazur V.Yu. Interaction of two quasimolecular electrons via the field of virtual photons as a second-order effect of quantum electrodynamics / V.Yu. Lazur, S.I. Myhalyna, O.K. Reity // Phys. Rev. A. — 2010. — V. 81, Iss. 6. — P. 062707(1–10).
- [9] Lazur V.Yu. The generalized Breit operator of the interaction between two quasimolecular electrons in the framework of the third-order effects of quantum electrodynamics / V.Yu. Lazur, O.K. Reity, O.F. Pavlyk // Journal of Physics A. — 2010. — V. 43, No. 17. — P. 175208(1–16).
- [10] Lazur V.Yu. The relativistic operator of interaction of two quasimolecular electrons as a third-order effect of quantum electrodynamics / V.Yu. Lazur, O.F. Pavlyk, O.K. Reity // Theoret. and Math. Phys. — 2010. — V. 165, Iss. 1. — P. 1293–1314.
- [11] Lazur V.Yu. The generalized Breit operator of a long-range type in the framework of the second-order effects of quantum electrodynamics / V.Yu. Lazur, S.I. Myhalyna, O.K. Reity // Int. J. of Mod. Phys. A. — 2010. — V. 25, No. 25. — P. 4775–4800.
- [12] Gadomskii O.N. Theory of Radiation from a System of Weakly Interacting Particles / O.N. Gadomskii, V.R. Nagibarov, N.K. Solovarov // Sov. Phys. JETP. — 1973. — V. 36, No. 3. — P. 426–429.
- [13] Gadomskii O.N. Relativistic effects in superradiance processes / O.N. Gadomskii, V.R. Nagibarov, N.K. Solovarov // Sov. Phys. JETP. — 1976. — V. 43, No. 2. — P. 225–230.
- [14] Chang C.S. Resonant Interaction between Two Neutral Atoms / C.S. Chang, P. Stehle // Phys. Rev. A. — 1971. — V. 4, Iss. 2. — P. 630–640.
- [15] Gadomsky O.N. The problem of two electrons in an external field and the method of integral equations in optics / O.N. Gadomsky, K.K. Altunin // J. Exp. Theor. Phys. — 1998. — V. 87, Iss. 5. — P. 842–854.

- [16] Ryabtsev I.I. Spectroscopy of cold rubidium Rydberg atoms for applications in quantum information / I.I. Ryabtsev, I.I. Beterov, D.B. Tretyakov, V.M. Entin, E.A. Yakshina // *Phys. Usp.* – 2016. – V. 59, No. 2. – P. 196–208.
- [17] Landau L.D. Course of Theoretical Physics. V. 3. Quantum Mechanics – Non-Relativistic Theory / L.D. Landau, E.M. Lifshits. – London: Pergamon Press, 1965. – 616 p.
- [18] Ахиезер А.И. Квантовая электродинамика / А.И. Ахиезер, В.Б. Берестецкий. – М.: Наука, 1981. – 428 с.
- [19] Лендъел В.И. Введение в теорию атомных столкновений / В.И. Лендъел, В.Ю. Лазур, М.И. Карбованец, Р.К. Янев. – Львов: Выща школа, 1989. – 192 с.
- [20] Stephen M.J. First Order Dispersion Forces / M.J. Stephen // *J. Chem. Phys.* – 1964. – V. 40, Iss. 3. – P. 669–673.
- [21] Simons G. New Model Potential for Pseudopotential Calculations / G. Simons // *J. Chem. Phys.* – 1971. – V. 55, Iss. 2. – P. 756–761.
- [22] Il'inova E.Y. Modified Fues potential for many-electron atoms / E.Y. Il'inova, V.D. Ovsyannikov // *Optics and Spectroscopy.* – 2008. – V. 105, Iss. 5. – P. 647–656.
- [23] Bateman H. Higher Transcendental Functions (Based on notes left by H. Bateman), Vol. 3 / H. Bateman, A. Erdélyi. – New York: McGraw-Hill, 1955. – 300 p.
- [24] Овсянников В.Д. Время жизни ридберговского атома / В.Д. Овсянников, И.Л. Глухов // *Вестник ВГУ, Серия: Физика. Математика.* – 2006. – № 2. – С. 99–106.

©Ужгородський національний університет

УДК 658.562:621
PACS 03.65.Ge, 02.30.Hq
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.85-91

A.I. Haysak, I.I. Haysak

Uzhhorod National University, 9A Kapitulna Str., 88000 Uzhhorod, Ukraine,
 e-mail: ivan.haysak@uzhnu.edu.ua

ON THE SINGULAR SOLUTION OF SCHRÖDINGER EQUATION FOR THE HYDROGEN ATOM

Purpose. The authors of known for us textbooks on quantum mechanics pay attention only to the first regular solution of Schrödinger equation for the hydrogen atom. To exclude the second linearly independent solution from the general solution, different textbooks give various arguments such as invalid boundary condition in the coordinate origin, the appearance of Dirac delta function or divergence of the kinetic energy in the origin.

Methods. Using the power series method, we obtained an exact analytic expression for the second independent solution of Schrödinger equation for the hydrogen atom.

Results. The solution consists of a sum of two parts, one of which increases indefinitely over long distances, while the other is limited and contains a logarithmic term. This feature is peculiar to all values of the orbital angular momentums.

Conclusions. On the example of the hydrogen atom, we demonstrated the mathematically correct algorithm of construction of the independent solutions for the power series method. In particular, this algorithm is important in the case of quantum systems with coupled channels which are described by two or more coupled Schrödinger equations.

Keywords: hydrogen atom, regular solution, singular solution, ordinary differential equation, indicial equation

Introduction

The problem for the hydrogen atom, as one of the few that allows an exact analytical solution, is considered for methodological reasons in most textbooks on quantum mechanics. One of the two independent solutions of the Schrödinger equation is square integrable and satisfies the boundary conditions at the coordinate origin ($r = 0$) and at infinity ($r \rightarrow \infty$). For states with orbital angular momentum $l \geq 1$, the second singular solution gives the divergence of the normalization integral at the point $r = 0$.

However, for the angular momentum $l = 0$, the singularity of the second solution is expressed weakly and does not lead to the divergence of the integral at the origin, but it is rejected by guiding various arguments in various textbooks. These arguments can be classified into three groups. The first group of textbooks [1–4] indicates the unsatisfactory bound-

ary conditions of the second solution at the origin. In another group of textbooks [5–7], it is indicated that this solution does not satisfy the Schrödinger equation at the origin of coordinates $r = 0$ due to the appearance of the Dirac function $\delta(r)$. In the practical textbook [8], there is argued that in the singular state of $l = 0$ the mean value of the kinetic energy takes the infinite, therefore this solution is unacceptable.

We tried to deal with this variety of arguments also because if the singular solution for the orbital moment $l = 0$ is possible to normalize, then it represents a state with limited energy of the system but an infinite average kinetic energy ($+\infty$) and infinite potential energy ($-\infty$), that is, the sum of two infinite quantities is finite

$$E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle E_K \rangle + \langle E_P \rangle = (+\infty) + (-\infty). \quad (1)$$

To demonstrate our investigation about

the singular solution we briefly repeat one of the methods for obtaining the analytical solution of the Schrödinger equation with the Coulomb potential.

The radial Schrödinger equation

In the Schrödinger equation

$$H\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (2)$$

with the Coulomb potential for the hydrogen atom

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}, \quad (3)$$

where μ is a reduced mass of the atom, one separates the variables in the spherical coordinate system

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= \Psi(r, \theta, \phi) = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi) = \\ &= \frac{u_l(r)}{r}Y_{lm}(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (4)$$

where $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ is spherical harmonics. For radial function $u_l(r)$, we obtain the equation

$$u_l'' + \left(-k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2A}{r} \right) \cdot u_l(r) = 0, \quad (5)$$

where l is the orbital angular momentum, and parameters k and A have the same dimension and are given by expressions

$$k^2 = \frac{2\mu|E|}{\hbar^2}, \quad A = \frac{e^2\mu}{\hbar^2} \quad (6)$$

The normalization of the radial function $u_l(r)$ looks as

$$\int_0^\infty u_l^2(r) \cdot dr = 1. \quad (7)$$

At large distance ($r \rightarrow \infty$) equation (5) takes the form (we will omit index l)

$$u'' - k^2 \cdot u(r) = 0, \quad (8)$$

and has two independent solutions e^{-kr} and e^{+kr} . Since the normalization condition is fulfilled for the asymptotic ($r \rightarrow \infty$) solution e^{-kr} , the radial function of equation (5) is sought in the form

$$u(r) = f(r) \cdot e^{-kr}, \quad (9)$$

which leads to an equation for the unknown function $f(r)$

$$f'' - 2kf' - \frac{l(l+1)}{r^2}f + \frac{2A}{r}f = 0. \quad (10)$$

We shall now look for solution of equation (10) by the power series method

$$f(r) = r^s \cdot \sum_{j=0}^{\infty} a_j r^j, \quad a_0 \neq 0, \quad (11)$$

where s and a_j are unknown parameters that are determined from the substitution of function (11) into equation (10) with subsequent zeroing of coefficients for each power of variable r . The coefficient at the lowest power gives the equation for determining the parameter s

$$a_0(s^2 - s - l^2 - l) = 0. \quad (12)$$

This equation has two solutions $s_1 = l + 1$ and $s_2 = -l$. Since the roots of the indicial equation (12) differ by an integer, according to [9,10] two independent solutions of the differential equation are defined in the way

$$f_1(r) = r^{l+1} \cdot \sum_{j=0}^{\infty} a_j r^j, \quad (13)$$

$$f_2(r) = r^{-l} \cdot \sum_{q=0}^{\infty} b_q r^q + g \cdot f_1(r) \cdot \ln(r), \quad (14)$$

where unknown coefficients a_j , b_q and g are successively determined by substituting the formulas (13) and (14) into equation (10) and equating to zero the coefficients for powers of the variable r .

The regular solution

Substituting formula (13) into equation (10) we obtain the following chain of equations for coefficients a_j

$$\begin{aligned} a_0(k \cdot l + k - A) - a_1(l + 1) &= 0, \\ a_1(k \cdot l + 2k - A) - a_2(2l + 3) &= 0, \dots \end{aligned} \quad (15)$$

In the general case, starting with coefficient a_1 , the following are sequentially

$$a_j = \frac{2 \cdot (k \cdot (l + j) - A)}{(2l + j + 1) \cdot j} \cdot a_{j-1}, \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (16)$$

The only coefficient a_0 remains indefinite, but it serves as a common factor and defines only the normalization of the function (13). The ratio of the coefficients of the series (13) with the growth of the index j gives the value

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{a_j}{a_{j-1}} = \frac{2k}{j}, \quad (17)$$

which corresponds to the ratio of coefficients of the Taylor series for the function e^{2kr} . That is, taking into account formula (9), the radial function $u(r)$ will behave like e^{kr} . However, when the coefficients of the series (13) vanish, starting with a_1 we break an infinite series and obtain a polynomial as the first independent solution. The zero value of the coefficient a_J can be achieved by a special choice of the parameter k (eigenvalue of the energy (6))

$$k = \frac{A}{l + J}, \quad J = 1, 2, 3, \dots \quad (18)$$

The given algorithm allows finding the eigenvalues of energy and the regular radial eigenfunction

$$u_1(r) = f_1(r) \cdot e^{-kr}, \quad (19)$$

where the coefficient a_0 is determined by the condition of normalization (7). In this case, the function $f_1(r)$ is a polynomial with powers of the variable from r^{l+1} up to r^{J+1} .

The singular solution

The second independent solution of equation (10) is given by formula (14), which includes the first solution (13). We note that for orbital momentum $l \geq 1$ the solution (14) is singular at zero, which does not allow normalizing the radial function. Therefore, we consider the case $l = 0$, when the solution is regular at zero. To simplify the calculations, we take into account the ground state ($l = 0, J = 1, k = A$) for which the first solution has the form $f_1(r) = a_0 \cdot r$. Then the formula for the second independent solution (14) will take the form

$$f_2(r) = \sum_{q=0}^{\infty} b_q r^q + g \cdot r \cdot \ln(r) \quad (20)$$

We substitute formula (20) into equation (10) and consistently vanish coefficients for every degree of variable r (logarithmic members are reduced autonomously). To determine unknown coefficients we obtain a chain of equations

$$\begin{aligned} 2Ab_0 + g &= 0, \quad 2b_2 - 2Ag = 0, \\ -2Ab_2 + 6b_3 &= 0, \quad -4Ab_3 + 12b_4 = 0, \\ -6Ab_4 + 20b_5 &= 0, \dots \end{aligned} \quad (21)$$

From these equations, one can sequentially find g, b_2, b_3, b_4 , etc. Coefficient b_1 remains uncertain. This reflects the fact that the sum of two independent solutions

$$f(r) = \alpha f_1(r) + \beta f_2(r) \quad (22)$$

is also a solution to the equation (10). For simplicity, the coefficient b_1 can be set to zero. The coefficient b_0 also remains as an indefinite common factor of the function $f_2(r)$. The chain of equations (21) is not interrupted, and the relation of neighboring coefficients with the growth of the index q has the same form as formula (17). Accordingly, an infinite series in (20) behaves asymptotically as e^{2kr} . So the second independent solution of the radial equation (5) will have a term that behaves like e^{kr} as $r \rightarrow \infty$. So, the two independent solutions of equation (5) for the ground state are

$$u_1(r) = a_0 \cdot r \cdot e^{-kr}, \quad (23)$$

$$u_2(r) = \left(\sum_{q=0}^{\infty} b_q r^q \right) \cdot e^{-kr} + g \cdot r \cdot \ln(r) \cdot e^{-kr}. \quad (24)$$

The first solution (23) is normalized (regular), and the second solution (24) is not normalized (singular) since the power series behaves like e^{2kr} at large distances.

Discussion and conclusion

We found the exact formula (14) of the second independent solution of the Schrödinger equation for the hydrogen atom, which contains a logarithmic term and satisfies the equation at the origin of the coordinate $r = 0$. For the orbital angular momentum $l = 0$, the second independent solution is finite at the origin but exponentially increases at long distances. The exponential behavior of the second independent radial solution at large distances is inherent for every value of the angular momentum l . That is, one independent solution of the radial Schrödinger equation for hydrogen-like atoms has a regular behavior and is normalized on the interval $[0, \infty)$, and the second independent solution is not normalized and exponentially increases at large values of variable r .

The exponential rise of the second independent solution of (5) can be proved by based

on general considerations. Namely, at large distances, the Schrödinger equation has two independent solutions $\tilde{u}_1(r) \sim e^{-kr}$ and $\tilde{u}_2(r) \sim e^{kr}$, which don't depend on orbital angular momentum l . At the origin of the coordinates, independent solutions are $u_1(r) \sim r^{l+1}$ and $u_2(r) \sim r^{-l}$. The solution $u_1(r)$ converges to the solution $\tilde{u}_1(r)$ as $r \rightarrow \infty$, but the independent solution $u_2(r)$ must converge either to the solution $\tilde{u}_2(r)$ or to linear sum $[\alpha \cdot \tilde{u}_1(r) + \beta \cdot \tilde{u}_2(r)]$ (here $\beta \neq 0$) as $r \rightarrow \infty$. That is the second solution exponentially rise at the infinite.

One can note that the Schrödinger equation for the scattering problem of an electron on a proton differs from equation (5) only by a sign of the parameter k^2 ($+k^2$ instead of $-k^2$). For such equation, two independent solutions are well known - the regular $F_l(k, r)$ and irregular (logarithmic) $G_l(k, r)$ Coulomb wave functions [11].

We want to emphasize that for the hydrogen atom with Coulomb potential and for deuteron wave function [12], the logarithmic term in (14) ensures the correct behavior of the solution at the origin. However, for other potentials, it can appear that the coefficient g in equation (14) is zero. Such situations are realized for mixed states of two quarks systems where mixing of orbital [13] or spin momentums [14, 15] can occur.

Acknowledgments

This work was supported by the grant of the Ministry of Education and Science of Ukraine No.0115U001098.

REFERENCES

- [1] Bethe, H.A., Salpeter, E.E. (1957), Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms, Academic Press, New York, 368 p.
- [2] Messiah, A. (1961), Quantum Mechanics, North-Holland, Amsterdam, 504 p.
- [3] Landau, L., Lifshitz, E. (1965), Quantum Mechanics, Pergamon Press, Oxford, 630 p.
- [4] Ballentine, L.E. (2000), Quantum Mechanics. A Modern Development, World Scientific, Singapore, 230 p.
- [5] Dirac, P.A.M. (1958), The Principles of Quantum Mechanics, Clarendon Press, Oxford, 315 p.

- [6] Fermi, E. (1960), Notes On Quantum Mechanics, The University of Chicago Press, 191 p.
- [7] Basdevant, J.L., Dalibard, J. (2002), Quantum Mechanics, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 533 p.
- [8] Flugge, S. (1971), Practical Quantum Mechanics, I and II, Springer-Verlag, Berlin, 618 p.
- [9] Kamke, E. (1997), Differentialgleichungen, I. Gewöhnliche Differentialgleichungen, Springer, New York, 663 p.
- [10] Slavyanov, S.Yu., Lay, W. (2000), Special Functions. A Unified Theory Based on Singularities, Oxford University Press, Oxford, 312 p.
- [11] Abramowitz, M., Stegun, I. (1983), Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, Dover Publications, New York, 1046 p.
- [12] Rarita, W., Schwinger, J. (1941), «On the Neutron-Proton Interaction», Phys. Rev., V. 59, pp. 436–451.
- [13] Haysak, I., Fekete, Yu., Morokhovych, V., Chalupka, S., Salak, M. (2005), «Spin effects in two quark system and mixed state», Cz. J. Phys., V. 55, pp. 541–554.
- [14] Haysak, I., Zhaba, V., Murin, P. (2009), «Analytical solution of a quantum system with coupled channels» [«Analitichne rishennya kvantovomekhanichnoyi systemy iz zvyazanymy kanalamy»], Uzhhorod University Scientific Herald, Series Physics [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fiz.], Issue 25, pp. 141–147.
- [15] Haysak, I., Murin, P., Zhaba, V. (2010), «An exactly solvable model with coupled channels», In: «The 11th Small Triangle Meeting - Kysak, September 20-23, 2009», Institute of Experimental Physics, Kosice, pp. 76–80.

Стаття надійшла до редакції 3.04.2019

А.И. Гайсак, И.И. Гайсак

Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Капитульная, 9А, Украина,
e-mail: ivan.haysak@uzhnu.edu.ua

СИНГУЛЯРНОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА

Методом разложения в степенной ряд, получено точное аналитическое выражение для второго независимого решения уравнения Шредингера для атома водорода. Решение состоит из суммы двух частей, одна из которых неограниченно возрастает на больших расстояниях, а вторая ограничена на бесконечности, хоть и содержит логарифмический множитель. Такая структура решения характерна для всех величин орбитального момента. В известных нам учебным пособиям по квантовой механике приводится только выражение для первого регулярного решения. Для исключения второго линейно независимого решения в разных учебниках приводятся различные аргументы.

Ключевые слова: атом водорода, регулярное решение, сингулярное решение, обыкновенное дифференциальное уравнение, характеристическое уравнение.

А.І. Гайсак, І.І. Гайсак

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Капітульна, 9А, Україна,
e-mail: ivan.haysak@uzhnu.edu.ua

СИНГУЛЯРНИЙ РОЗВ'ЯЗОК РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА ДЛЯ АТОМА ВОДНЮ

Методом розкладу в степеневий ряд, отримано точний аналітичний вираз для другого незалежного розв'язку рівняння Шредінгера для атома водню. Розв'язок складається з двох доданків, один з яких необмежено зростає на великих відстанях, а другий на нескінченості прямує до нуля, хоч і містить логарифмічний множник. Така структура розв'язку характерна для всіх величин орбітального моменту. У відомих нам підручниках по квантовій механіці наводиться тільки вираз для першого регулярного розв'язку. Для усунення другого лінійно незалежного розв'язку в різних підручниках наводяться різні аргументи.

Ключові слова: атом водню, регулярний розв'язок, сингулярний розв'язок, звичайне диференціальне рівняння, характеристичне рівняння.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Bethe H.A. Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms / H.A. Bethe, E.E. Salpeter. – New York: Academic Press, 1957. – 368 p.
- [2] Messiah A. Quantum Mechanics / A. Messiah. – Amsterdam: North-Holland, 1961. – 504 p.
- [3] Landau L. Quantum Mechanics / L. Landau, E. Lifshitz. – Oxford: Pergamon Press, 1965. – 630 p.
- [4] Ballentine L.E. Quantum Mechanics. A Modern Development / L.E. Ballentine. – Singapore: World Scientific, 2000. – 230 p.
- [5] Dirac P.A.M. The Principles of Quantum Mechanics / P.A.M. Dirac. – Oxford: Clarendon Press, 1958. – 315 p.
- [6] Fermi E. Notes On Quantum Mechanics / E. Fermi. – Chicago: The University of Chicago Press, 1960. – 191 p.
- [7] Basdevant J.L. Quantum Mechanics / J.L. Basdevant, J. Dalibard. – Berlin: Springer-Verlag, 2002. – 533 p.
- [8] Flugge S. Practical Quantum Mechanics, I and II / S. Flugge. – Berlin: Springer-Verlag, 1971. – 618 p.
- [9] Kamke E. Differentialgleichungen, I. Gewöhnliche Differentialgleichungen / E. Kamke. – New York: Springer, 1997. – 663 p.
- [10] Slavyanov S.Yu. Special Functions. A Unified Theory Based on Singularities / S.Yu. Slavyanov, W. Lay. – Oxford: Oxford University Press, 2000. – 312 p.

- [11] Abramowitz M. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables / M. Abramowitz, I. Stegun. — New York: Dover Publications, 1983. — 1046 p.
- [12] Rarita W. On the Neutron-Proton Interaction / W. Rarita, J. Schwinger // Phys. Rev. — 1941. — V. 59. — P. 436–451.
- [13] Haysak, I. Spin effects in two quark system and mixed state / I. Haysak, Yu. Fekete, V. Morokhovych, S. Chalupka, M. Salak // Cz. J. Phys. — 2005. — V. 55. — P. 541–554.
- [14] Гайсак І.І. Аналітичне рішення квантовомеханічної системи із зв'язаними каналами / І.І. Гайсак, В.І. Жаба, П. Мурін // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. — 2009. — Випуск 25. — С. 141–147.
- [15] Haysak I. An exactly solvable model with coupled channels, / I. Haysak, P. Murin, V. Zhaba // In: «The 11th Small Triangle Meeting - Kysak, September 20-23, 2009» — Kosice: Institute of Experimental Physics, 2010. — P. 76–80.

©Ужгородський національний університет

УДК 539.12.01
 PACS 11.10.-z
 DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.92-103

В. М. Симулик¹, Т. М. Заяць²

¹Інститут електронної фізики НАН України, 88017, Ужгород, вул. Університетська, 21, Україна,
 e-mail: vsimulik@gmail.com

²Ужгородський національний університет, Інженерно-технічний факультет, кафедра електронних систем, 88000, Ужгород, вул. Капітульна, 13, Україна,
 e-mail: taras.zajac@uzhnu.edu.ua

РІЗНОМАНІТТЯ ПІДХОДІВ ДО ПИТАННЯ ПРО ВИВЕДЕННЯ РІВНЯННЯ ДІРАКА

Представлено 26 варіантів виводу рівняння Дірака, які базуються на різних фізичних принципах і математичних формалізмах. Наведено три оригінальні підходи авторів до вирішення цієї задачі: узагальнення виводу Г. Саллгофера, отримання безмасового рівняння Дірака з рівнянь Максвелла у максимально симетричній формі, вивід рівняння Дірака з ненульовою масою з релятивістської квантової механіки дублета ферміон-антиферміон спінів $s = 1/2$. Започатковано демонстрацію ролі рівняння Дірака у сучасній теоретичній фізиці.

Ключові слова: рівняння Дірака, спінорне поле, квантова механіка, теорія поля.

Вступ

Рівняння Дірака понад 90 років (1928–2018) є одним з основних рівнянь теоретичної фізики. Його застосування вже давно вийшло далеко за межі квантової механіки, квантової теорії поля, атомної та ядерної фізики і фізики твердого тіла.

Влучний вивід того чи іншого рівняння математичної фізики є першим кроком до його успішного застосування, адже кожен такий вивід базується на фундаментальних математичних принципах і фізичних основах відповідної моделі фізичної реальності.

Вступ до розгляду рівняння Дірака станом на сьогодні налічує біля 30 різноманітних підходів лише до задачі виводу цього рівняння. Нижче ми представляємо основні положення 26 з них, у тому числі і три наші власні оригінальні виводи.

Мінімум необхідних позначень

Система одиниць $\hbar = c = 1$. Метрика $g = (g^{\mu\nu}) = (+ - - -)$, $a^\mu = g^{\mu\nu} a_\nu$, по індексу, що повторюється двічі, – сумування.

Рівняння Дірака для вільного поля:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi(x) = 0, \quad (1)$$

де $x \in M(1, 3)$, $\partial_\mu \equiv \partial/\partial x^\mu$, $\mu = \overline{0, 3}$, $j = 1, 2, 3$; $M(1, 3) = \{x \equiv (x^\mu) = (x^0 = t, \vec{x} \equiv (x^j))\}$ – простір-час Мінковського, а 4-компонентна функція $\psi(x)$, взагалі кажучи, належить оснащеному простору Гільберта $S^{3,4} \subset H^{3,4} \subset S^{3,4*}$. Тут $S^{3,4}$ – простір основних функцій Шварца, а $S^{3,4*}$ – простір узагальнених функцій Шварца. Зауважимо, що у квантово-механічних теоріях, де часова змінна відіграє роль параметра, слід використовувати саме простір $S^{3,4} \subset H^{3,4} \subset S^{3,4*}$, однак у формалізмі явно коваріантної теорії поля оснащений простір Гільберта вибираємо у вигляді $S^{4,4} \subset H^{4,4} \subset S^{4,4*}$. Матриці Дірака, які задовольняють антикомутаційним співвідношенням алгебри Кліффорда, вибираємо у представленні Дірака-Паулі

$$\gamma^0 = \begin{vmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{vmatrix}, \quad \gamma^\ell = \begin{vmatrix} 0 & \sigma^\ell \\ -\sigma^\ell & 0 \end{vmatrix}, \quad (2)$$

$$\ell = 1, 2, 3, \quad \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu},$$

де σ^ℓ – стандартні матриці Паулі.

Відомі і маловідомі підходи

Очевидно, що *перший вивід* належить самому *Полю Діраку*. Викладки легко знайти у статті Дірака 1928 р. і його монографії [1].

Ван дер Варден та Сакураї, див., наприклад, [2], доповнили формалізм виводу Дірака використанням додаткового співвідношення $(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) = \vec{p}^2$ і, кінцево, факторизації у вигляді $(p^0 + \vec{\sigma} \cdot \vec{p})(p^0 - \vec{\sigma} \cdot \vec{p}) = m^2$.

Сучасного вигляду факторизація оператора Клейна-Гордона набуває у *Н.Н. Боголюбова та Д.В. Ширкова* [3]

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)(i\gamma^\nu \partial_\nu + m) = -\partial^\alpha \partial_\alpha + m^2, \quad (3)$$

де використано також антикомутаційні співвідношення алгебри Кліффорда (2).

Вивід рівняння Дірака з *варіаційного принципу* найменшої дії Ейлера-Лагранжа також легко знайти у [3].

У монографії *Л. Райдера* [4] (друге видання) дане рівняння отримано з *явно коваріантних трансформаційних властивостей 4-компонентного спінора*. Автори [5] стверджують, що зуміли суттєво покращити вивід *Л. Райдера*.

Вивід рівняння Дірака з *первісних геометричних властивостей простору часу і електрона* разом з широким обговоренням геометричних принципів побудови теорії електрона є основним змістом монографії *Х. Келлера* [6]. Використано ідеї висловлені ще у 1929 р. *В.О. Фоком і Д.Д. Іваненко* про геометричний сенс γ -матриць Дірака.

У рамках теоретико-групового підходу до фізики елементарних частинок рівняння Дірака слідує з *класифікації Баргмана-Вігнера елементарних частинок* довільної маси і спіна на основі незвідних представлень групи Пуанкаре, див., наприклад, [7]. Гамільтоніан Дірака відповідає незвідному представленню цієї групи, яке характеризується власними значеннями $m > 0$ і $s = 1/2$ відповідних операторів Казіміра.

Рівняння Дірака (1) є *частинним випадком рівняння Баргмана-Вігнера* [8] для полів довільного спіна. Нескладне виписування частинного випадку цього рівняння для спіна $s=1/2$ приводить $2s \cdot 4$ -компонентне рів-

няння Баргмана-Вігнера до 4-компонентного рівняння Дірака. Однак такий вивід рівняння Дірака є дещо умовним, адже рівняння Баргмана-Вігнера було введено в розгляд як $2s \cdot 4$ -компонентне узагальнення рівняння Дірака.

У відомій роботі *Л. Фолді і С. Воутхайсена* [9] легко побачити обернену до відомого одноіменного перетворення задачу – *вивід рівняння Дірака з канонічного рівняння Фолді-Воутхайсена*.

Інтригуючий вивід був запропонований *Річардом Фейнманом* (для випадку $SO(1,1)$ алгебри з одним просторовим і одним часовим вимірами) і був сформульований як задача у його книзі з *А. Гіббсом* [10]. Цей підхід станом на сьогодні кількома авторами продовжено до загального випадку, коли інтеграл по траєкторії містить узагальнення обрізаної моделі Фейнмана на $3+1$ просторово-часові виміри.

Несподівані нетрадиційні виведення

Мабуть першим тут слід згадати австрійського вченого *Ганса Саллгофера* (одного з учнів *Ервіна Шредингера*), який довів твердження [11], що *матричне множення рівнянь електродинаміки Максвелла у середовищі* (без струмів і зарядів) на вектор Паулі $\vec{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3)$ дає *безмасове стаціонарне рівняння Дірака*. Не зупиняючись на цьому, а взявши свій результат за основу, він ввів у розгляд представлення (тут $\hbar \neq c \neq 1$)

$$\begin{aligned} \varepsilon(\vec{x}) &= 1 - (\Phi(\vec{x}) - mc^2)/\hbar\omega, \\ \mu(\vec{x}) &= 1 - (\Phi(\vec{x}) + mc^2)/\hbar\omega, \end{aligned} \quad (4)$$

для електричної і магнітної проникливостей середовища, $\Phi(\vec{x}) = -Ze^2/|\vec{x}|$ – зовнішнє кулонівське поле. У якості кінцевого результату в [12] формулу Зоммерфельда-Дірака для тонкої структури спектра водню було виведено з рівнянь Максвелла у середовищі (4) (вперше після Дірака з принципово іншого рівняння і навіть без апелювання до квантово-механічних принципів). Таким чином, роботи [11,12] містять значно більше інформації, ніж просто вивід рівняння Дірака з рівнянь Максвелла.

У роботі [13] показано, що релятивістське рівняння для частинок зі спіном $1/2$ може бути отримано розширенням теорії стохастичних процесів на один крок за межі теорії комплексних мір. Введено в розгляд процеси на основі кватерніонних мір, а *рівняння Дірака виведено з рівняння Ланжевена для двозначних процесів*. Таким чином, запропоновано прямий вивід рівняння Дірака через кватерніонні міри.

Автор [14] виводить рівняння Дірака із закону збереження струму спіна $1/2$. Вимога, що такий струм спіна $1/2$ зберігається, приводить до однозначної фіксації Лоренц-інваріантного рівняння для релятивістського поля спіна $1/2$. Якщо так, то чим виділений закон збереження спінового струму у порівнянні з іншими величинами, що зберігаються? Логічно очікувати успішних висновків рівняння Дірака і з інших законів збереження для спінорного поля. Нагадаємо, їх існує 10 лише внаслідок Пуанкаре-інваріантності рівняння Дірака, також відомо багато прихованих симетрій [15] цього рівняння, і додаткових, прихованих законів збереження [16], у тому числі і бозонних величин [17], що зберігаються. Зміст наших коментарів дещо применшує значення викладеного у [14] підходу.

У [18] представлено вивід рівняння Дірака з *основного рівняння процесу Пуассона* на основі аналітичного продовження. Виконано узагальнення на випадок руху частинки у зовнішньому полі. Показано, що таким чином узагальнене основне рівняння процесу Пуассона тісно зв'язане з трьохвимірним рівнянням Дірака у зовнішньому полі.

Суть методу, представленого у [19], полягає у виводі рівняння Дірака з *так званого релятивістського другого закону Ньютона*. Однак, для цього автор пропонує цілу низку своїх власних означень, понять і, навіть, спеціальних моделей. Побудовано формалізм, що зв'язує таку спеціальну форму релятивістської механіки з квантовою механікою. Вивід рівняння Дірака здійснено саме у рамках такого специфічного формалізму. Автор вводить у розгляд концепцію поля швидкостей, а рівняння Дірака виводить із відповідного польового рівняння. Очевидно,

що якимось важливе досягнення тут складно очікувати. Таке враження, що автор [19] шукає узгодження свого підходу з добре апробованою моделлю Дірака.

Ще один *геометричний вивід рівняння Дірака* знаходимо у [20]. Автори розглядають частинку зі спіном $1/2$, що рухається зі швидкістю світла у кубічній просторово-часовій ґратці. Маса частинки спричинює перевертання багатокomпонентної хвильової функції на ділянках решітки. Починаючи з диференціального рівняння для випадку одного просторового і одного часового вимірів, автори узагальнюють підхід до вищих вимірів. Розглянуто також взаємодії з зовнішніми електромагнітним і гравітаційним полями. Відмічено, що ідея такого виведення ґрунтується на спостереженні Дірака, що оператори миттєвої швидкості ферміона зі спіном $1/2$ мають власні значення $\pm c$. Зауважимо, що сьогодні цей факт розглядається як недолік квантово-механічної інтерпретації рівняння Дірака, який продемонстровано, пояснено і вперше подолано у [9]. На геометричний підхід Фока, Іваненко, Келлера [6] автори не посилаються, очевидно, що це різні підходи. Недоліком підходу [20] є апелювання до таких речей як швидкість $\pm c$ масивного ферміона.

Автори [21] пропонують *виводити рівняння Дірака з геодезичного рівняння*. Для цього використовується математичний інструмент бікватерніонів Гамільтона. Такий вивід є частиною розроблюваного авторами власного підходу, що базується на застосуванні теорії масштабної інваріантності, переформулюванні квантової механіки та специфічних уявлень про простір-час.

М. Еванс [22] запропонував власне загальноковаріантне *польове рівняння для опису гравітації та електромагнетизму*, представив його у термінах спінора і отримав рівняння Дірака після переходу до плоского простору Евкліда.

Автор [23] спочатку визначає кожен власну функцію зв'язаної частки як специфічну суперпозицію плоских хвильових станів, що задовольняє усередненому енергетичному співвідношенню. Після цього рівняння Шредінґера і Дірака (у зовнішньому по-

лі електромагнітного потенціалу) отримано як однозначні умови, які хвильова функція повинна задовольняти в кожній точці, щоб виконувалось відповідне рівняння для енергії.

Вивід рівняння Дірака представлений у [24] фактично базується на факторизації оператора Клейна-Гордона (3). По суті добавлено лише зовнішнє гравітаційне поле.

У роботі [25] рівняння Дірака виведено на основі конформної диференціальної геометрії. Встановлено, що рівняння Гамільтона-Якобі для частки може бути лінеаризовано, точно і в замкнутій формі, за допомогою анзацного розв'язку, який можна безпосередньо інтерпретувати як квантову хвильову функцію (4-спінор) рішення рівняння Дірака. Всі квантові ознаки виникають в результаті тонкої взаємодії між конформною кривизною, що діє на частинку як потенціал, і руху частинки, що впливає на таку геометричну потенціальність, пов'язану з конформною кривизною. В результаті рівняння Дірака виведено у вигляді: $D_+ D_- \psi = D_- D_+ \psi = 0$, $D_\pm \equiv \gamma^\mu (i\partial_\mu - eA_\mu) \pm m$.

Нещодавно в [26] було представлено виведення рівняння Дірака з принципів обробки інформації. Без застосування принципу відносності показано, як рівняння Дірака в трьох просторових вимірах слідує з широкомасштабної динаміки мінімального нетривіального квантового коміркового автомата, що задовольняє вимогам унітарності, локальності, однорідності і дискретної ізоотропії. Рівняння Дірака має місце для малих хвильових векторів і інерційних мас, тоді як Лоренц-коваріантність зникає в ультрарелятивістській межі. Таким чином, автомат можна розглядати як модель, що уніфікує масштаби від Планка до Фермі.

Наш внесок

Коротко розглянемо три оригінальні виводи рівняння Дірака, які були запропоновані ужгородськими вченими.

І. Узагальнення виводу Г. Саллгофера

У роботі [27] ідея Г. Саллгофера [11] узагальнена на випадок нестационарного рівняння

Дірака і представлена у рамках цілком іншого формалізму. Основне твердження полягає у наступному.

Рівняння Максвелла у термінах напруженостей $\vec{E}$, $\vec{H}$ електричного та магнітного полів (тут швидкість світла c , ε , μ – електрична і магнітна проникливості середовища) у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon}{c} \partial_0 \vec{E} - \text{curl} \vec{H} &= 0, \quad \text{div} \vec{E} = 0, \\ \frac{\mu}{c} \partial_0 \vec{H} + \text{curl} \vec{E} &= 0, \quad \text{div} \vec{H} = 0, \end{aligned} \quad (5)$$

слідують з рівняння Дірака ($m = 0$), записаного наступним чином

$$\begin{aligned} \left[\vec{\alpha} \cdot \nabla - \begin{pmatrix} \varepsilon I_2 & 0 \\ 0 & \mu I_2 \end{pmatrix} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right] \psi^{\text{el}} &= 0, \\ \vec{\alpha} &= \gamma^0 \vec{\gamma}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\psi^{\text{el}} = \text{col}(iE^3, i(E^1 + iE^2), H^3, H^1 + iH^2).$$

З (5), (6) очевидно, що множина розв'язків рівнянь Максвелла (5) є підмножиною розв'язків рівняння Дірака (1) з $m = 0$. Тому обернене твердження про те, що рівняння Дірака (1) з $m = 0$ слідує з рівнянь Максвелла (5) не є настільки безпосереднім. Окрім того, що слід покласти $\varepsilon = \mu = 1$, необхідно також доповнити 4-компонентний вектор-стовпець ψ^{el} із (6), який містить 6 дійсних компонент, до стандартного 4-компонентного спінора Дірака, який містить 8 дійсних компонент. У [27] наведено також повний набір перетворень типу стовпця ψ^{el} із (6), число таких перетворень – вісім.

Робота [28] присвячена зв'язку вільних рівнянь Максвелла (5), коли $\varepsilon = \mu = 1$, з безмасовим рівнянням Дірака. У [28] досліджено співвідношення між такими характеристиками вільних рівнянь Максвелла та Дірака з $m = 0$, як лагранжеві підходи, закони збереження, симетрії та розв'язки. Г. Саллгофер [11] назвав свій результат як МДІ – Максвелл-Дірак ізоморфізм. Навіть з короткого розгляду вище, очевидно, що математичний ізоморфізм тут не має місце. Ми використовували такі терміни як зв'язки між рівняннями Максвелла та Дірака, взаємозв'язки, співвідношення між цими рівня-

ннями. У огляді Х. Келлера [29] результати, представлені у [11, 27, 28], названо *відображенням формалізму Максвелла на формалізм Дірака*.

II. Вивід з рівнянь Максвелла у максимально симетричній формі

Нагадаємо, що Дж. К. Максвелл вивів систему рівнянь для опису електромагнітних явищ на основі узагальненого запису всіх відомих законів електродинаміки Фарадея, Ампера, Вебера і т.д., а також з принципу симетрії. По аналогії з ідеями Максвелла у [30] використовується можливо найбільш симетрична форма рівнянь Максвелла, що має 256 вимірну алгебру інваріантності [31]. Саме така система рівнянь Максвелла виявляється безпосередньо пов'язаною з безмасовим рівнянням Дірака [32].

Суть нашого твердження наступна.

Рівняння Максвелла з густинами струмів і зарядів градієнтного типу (E^0 , H^0 – скалярні поля розмірності напруженостей)

$$\begin{aligned}\partial_0 \vec{E} &= \text{curl} \vec{H} - \text{grad} E^0, \\ \partial_0 \vec{H} &= -\text{curl} \vec{E} - \text{grad} H^0, \\ \text{div} \vec{E} &= -\partial_0 E^0, \quad \text{div} \vec{H} = -\partial_0 H^0,\end{aligned}\quad (7)$$

безпосередньо слідує з рівняння Дірака (1) (при $m = 0$) внаслідок підстановки в $i\gamma^\mu \partial_\mu \psi(x) = 0$ вектора-стовпця

$$\psi = \begin{pmatrix} E^3 + iH^0 \\ E^1 + iE^2 \\ iH^3 + E^0 \\ -H^2 + iH^1 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

а рівняння Дірака (1) (з $m = 0$) безпосередньо слідує з рівнянь Максвелла (7) внаслідок оберненого перетворення і заміни у (8) вісімки фіксованих електромагнітних функцій ($\vec{E}$, $\vec{H}$, E^0 , H^0) на вісім довільних дійсних компонент 4-спінора Дірака ($m = 0$).

На відміну від формалізму з пункту I цього розділу, тут маємо взаємно-однозначну відповідність між розв'язками рівнянь Максвелла (7) і рівняння Дірака (1) (з $m = 0$), що суттєво спрощує вивід останнього. Про Бозе-симетрії безмасового рівняння Дірака та Фермі-симетрії рівнянь Максвелла

(7), а також про інші споріднені результати, див. [30–32].

III. Вивід рівняння Дірака для спірного поля з релятивістської квантової механіки дублета ферміон-антиферміон спінів $s = 1/2$.

Релятивістське квантово-механічне рівняння руху дублета ферміон-антиферміон спінів $s=1/2$ має вигляд:

$$i\partial_t f(x) = \sqrt{m^2 - \Delta} f(x), \quad f = \begin{pmatrix} f^1 \\ f^2 \\ f^3 \\ f^4 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

Модель фізичної реальності, яка базується на цьому рівнянні, розглядуваному у оснащеному просторі Гільберта $S^{3,4} \subset H^{3,4} \subset S^{3,4*}$, ми називаємо релятивістською канонічною квантовою механікою розглядуваного дублета, оскільки воно безпосередньо пов'язане із релятивістським співвідношенням між енергією, імпульсом та масою частинки. Саме рівняння (9) та його узагальнення на спіновий дублет частинка-античастинка довільної розмірності ми запропонували називати [33] рівнянням Шредінгера-Фолді. Однокомпонентне рівняння (9), див., наприклад, [34], називають також безспіновим рівнянням Салпітера або рівнянням процесу Леві [35]. Детальніше про рівняння (9) та про релятивістську канонічну квантову механіку див. у [36].

Наше твердження наступне.

Рівняння Дірака з відмінною від нуля масою записане у формі Гамільтона

$$i\partial_0 \psi(x) = (\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{p} + \gamma^0 m) \psi(x)$$

слідує з рівняння (9) у результаті операторного перетворення, яке задається продовженим оператором Фолді-Воутхайсена V для операторів у антиермітовій формі

$$\begin{aligned}V(\partial_0 + i\omega)V^{-1} &= \partial_0 + i(\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{p} + \gamma^0 m), \\ \psi^{\text{Dirac}}(x) &= V f^{\text{Sr-Foldy}}(x),\end{aligned}\quad (10)$$

де $\omega = \sqrt{-\Delta + m^2} = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$. Оператор V має вигляд:

$$V = \frac{i\gamma^\ell \partial_\ell + \omega + m}{\sqrt{2\omega(\omega + m)}} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C \end{vmatrix}, \quad V^{-1} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C \end{vmatrix} \frac{-i\gamma^\ell \partial_\ell + \omega + m}{\sqrt{2\omega(\omega + m)}},$$

і задовольняє умовам $VV^{-1} = V^{-1}V = I$. Тут оператор комплексного спряження $C\psi^1 = \psi^{1*}$, (оператор інволюції у просторі Гільберта $H^{3,1}$). Обернене до (10) перетворення також справедливе і переводить рівняння Дірака для вільного спінорного поля у рівняння (9) релятивістської канонічної квантової механіки для дублету ферміон-антиферміон спінів $s = 1/2$.

Висновки

Представлено оригінальні дослідження такої важливої задачі сучасної теоретичної фізики як вивід рівняння Дірака. Продемонстровано найрізноманітніші підходи і апелювання до незалежних математичних формалізмів, зокрема, виведення рівняння Дірака з принципів обробки інформації, або отримання цього рівняння на основі конформної диференціальної геометрії (всього 26 різних методів).

Відмічено суттєвий внесок у дану проблематику вчених з Ужгорода, а саме: узагальнення виводу Г. Саллгофера, або відображення формалізму Максвелла на формалізм Дірака; отримання безмасового рівняння Дірака з рівнянь Максвелла у максимально симетричній формі; вивід рівняння Дірака з ненульовою масою з релятивіст-

ської квантової механіки дублета ферміон-антиферміон спінів $s=1/2$. Наявність великої кількості різних методів виводу рівняння Дірака свідчить про важливу роль цього рівняння у фізиці сьогодення.

Виконаний аналіз дає можливість порівняти різні методи виведення рівняння Дірака. Можливо найпростішим є представлений у [3] підхід на основі старту з рівняння Клейна-Гордона. Але такий вивід перестає бути простим, якщо для початку обосновувати саме рівняння Клейна-Гордона. Цікавіше порівнювати фундаментальність різних виводів, їх фізичне та філософське значення. Тоді слід згадати [33], де рівняння Дірака виведено з релятивістської канонічної механіки дублета ферміон-антиферміон, яка є більш фундаментальною моделлю фізичної реальності ніж модель Дірака спінорного поля на класичному рівні. Однак найфундаментальнішим, безперечно, є вивід рівняння Дірака з принципу найменшої дії Ейлера-Лагранжа у застосуванні до класичного поля спінів.

Автори сподіваються, що стаття викличе інтерес не лише науковців, але й викладачів вузів, які готують лекції з квантової механіки та квантової теорії поля, знадобиться аспірантам та студентам-старшокурсникам для поглибленого вивчення методів сучасної теоретичної фізики.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Dirac P.A.M. The principles of quantum mechanics / P.A.M. Dirac. – Oxford: Clarendon Press, 1958. – 314 p.
- [2] Sakurai J. Advanced quantum mechanics / J. Sakurai. – New York: Addison-Wesley Pub. Co, 1967. – 335 p.
- [3] Bogoliubov N.N. Introduction to the theory of quantized fields / N.N. Bogoliubov N.N., D.V. Shirkov. – New York: John Wiley and Sons Inc., 1980. – 620 p.
- [4] Ryder L. Quantum field theory / L. Ryder Cambridge: Cambridge University Press, 1996. – 487 p.

- [5] Gaioli F. Some remarks about intrinsic parity in Ryder's derivation of the Dirac equation / F. Gaioli, E. Alvarez // *American Journal of Physics*. – 1995. – V. 63, № 2. – P. 177–178.
- [6] Keller J. Theory of the electron. A theory of matter from Start / J. Keller. – Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2001. – 257 p.
- [7] Wightman A. Analytic functions of several complex variables // *Dispersion relations and elementary particles*, eds. C. DeWitt, R. Omnes / A. Wightman. – New York: John Wiley and Sons Inc., 1960. – P. 159–221.
- [8] Bargman V. Group theoretical discussion of relativistic wave equations / V. Bargman, E.P. Wigner // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA*. – 1948. – V. 34, № 5. – P. 211–223.
- [9] Foldy L.L. On the Dirac theory of spin 1/2 particles and its non-relativistic limit. / L.L. Foldy, S.A. Wouthuysen // *Physical Review*. – 1950. – V. 78, № 1. – P. 29–43.
- [10] Feynman R.P. Quantum Mechanics and Path Integrals / R.P. Feynman, A.R. Hibbs. – New York: McGraw-Hill, 1965. – 365 p.
- [11] Sallhofer H. Elementary derivation of the Dirac equation X / H. Sallhofer // *Zeitschrift für Naturforschung*. – 1986. – V. A41, № 3. – P. 468–470.
- [12] Sallhofer H. Hydrogen in electrodynamics VI, The general solution / H. Sallhofer H // *Zeitschrift für Naturforschung*. – 1990. – V. A45, № 11–12. – P. 1361–1366.
- [13] Strinivasan S. Direct derivation of the Dirac equation via quaternion measures / S. Strinivasan, E.A. Sudarshan // *Journal of Physics*. – 1996. – V. A29, № 16. – P. 5181–5186.
- [14] Lerner L. Derivation of the Dirac equation from a relativistic representation of spin / L. Lerner // *European Journal of Physics*. – 1996. – V. 17, № 4. – P. 172–175.
- [15] Krivsky I.Yu. Fermi-Bose duality of the Dirac equation and extended real Clifford-Dirac algebra / I.Yu. Krivsky, V.M. Simulik // *Condensed Matter Physics*. – 2010. – V. 13, № 4. – P. 43101(1–15).
- [16] Simulik V.M. Lagrangian for the spinor field in the Foldy-Wouthuysen representation / V.M. Simulik, I.Yu. Krivsky, I.L. Lamer // *International Journal of Theoretical and Mathematical Physics*. – 2013. – V. 3, № 4. – P. 109–116.
- [17] Simulik V.M. Bosonic symmetries, solutions and conservation laws for the Dirac equation with nonzero mass / V.M. Simulik, I.Yu. Krivsky, I.L. Lamer // *Ukrainian Journal of Physics*. – 2013. – V. 58, № 6. – P. 523–533.
- [18] Kubo T. A derivation of the Dirac equation in an external field based on the Poisson process / T. Kubo, I. Ohba, H. Nitta // *Physics Letters*. – 2001. – V. A286, № 4. – P. 227–230.
- [19] Cui H. A method deriving the Dirac equation from the relativistic Newton's second law [Электронный ресурс] / H. Cui. // *arXiv:quant-ph/0102114*. – 2001. – 4 p. – Режим доступа: <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0102114>.
- [20] Ng Y.J. A geometrical derivation of the Dirac equation / Y.J. Ng, H. van Dam // *Physics Letters*. – 2003. – V. 309, № 5–6. – P. 335–339.
- [21] Calerier M. A scale relativistic derivation of the Dirac equation / M. Calerier, L. Nottale // *Electromagnetic Phenomena*. – 2003. – V. 3, № 1(9). – P. 70–80.

- [22] Evans M. Derivation of Dirac's equation from the Evans wave equation / M. Evans // *Foundation of Physics Letters*. — 2004. — V. 17, № 2. — P. 149–166.
- [23] Efthimiades S. Physical meaning and derivation of Schrodinger and Dirac equations [Електронний ресурс] / S. Efthimiades // *arXiv:quant-ph/0607001*. — 2006. — 8 p. — Режим доступу: <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0607001>.
- [24] Arminjon M. Dirac equation from the Hamiltonian and the case with a gravitational field / M. Arminjon // *Foundation of Physics Letters*. — 2006. — V. 19, № 3. — P. 225–247.
- [25] Santamato E. Derivation of the Dirac equation by conformal differential geometry / E. Santamato, F. de Martini // *Foundation of Physics*. — 2013. — V. 43, № 5. — P. 631–641.
- [26] D'Ariano G.M. Derivation of the Dirac equation from principles of information processing / G.M. D'Ariano, P. Perinotti // *Physical Review*. — 2014. — V. A90, № 6. — P. 062106(1–18).
- [27] Simulik V.M. Some algebraic properties of Maxwell-Dirac isomorphism / V.M. Simulik // *Zeitschrift für Naturforschung*. — 1994. — V. A49, № 11. — P. 1074–1076.
- [28] Simulik V.M. Connection between the symmetry properties of the Dirac and Maxwell equations. Conservation laws / V.M. Simulik // *Theoretical and Mathematical Physics*. — 1991. — V. 87, № 1. — P. 386–393.
- [29] Keller J. On the electron theory / J. Keller // *Advances in Applied Clifford Algebras*. — 1997. — V. 7, № Special. — P. 3–26.
- [30] Simulik V.M. Slightly generalized Maxwell classical electrodynamics can be applied to inneratomic phenomena / V.M. Simulik, I.Yu. Krivsky // *Annales de la Fondation Louis de Broglie*. — 2002. — V. 27, № 2. — P. 303–328.
- [31] Simulik V.M. Relationship between the Maxwell and Dirac equations: symmetries, quantization, models of atom / V.M. Simulik, I.Yu. Krivsky // *Reports on Mathematical Physics*. — 2002. — V. 50, № 3. — P. 315–328.
- [32] Simulik V.M. Classical electrodynamical aspect of the Dirac equation / V.M. Simulik, I.Yu. Krivsky // *Electromagnetic Phenomena*. — 2003. — V. 3, № 1(9). — P. 103–114.
- [33] Simulik V.M. Quantum-mechanical description of the fermionic doublet and its link with the Dirac equation / V.M. Simulik, I.Yu. Krivsky // *Ukrainian Journal of Physics*. — 2013. — V. 58, № 12. — P. 1192–1203.
- [34] Simulik V.M. Derivation of the Dirac and Dirac-like equations of arbitrary spin from the corresponding relativistic canonical quantum mechanics / V.M. Simulik // *Ukrainian Journal of Physics*. — 2015. — V. 60, № 10. — P.985–1006.
- [35] Simulik V.M. Link between the relativistic canonical quantum mechanics of arbitrary spin and the corresponding field theory / V.M. Simulik // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2016. — V. 670. — P. 012047(1–14).
- [36] Simulik V.M. Relativistic wave equations of arbitrary spin in quantum mechanics and field theory, example spin $s = 2$ / V.M. Simulik // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2017. — V. 804. — P. 012040(1–10).

Стаття надійшла до редакції 09.07.2019

В. М. Симулик¹, Т. М. Заяц²

¹Институт электронной физики НАН Украины, 88017, Ужгород, ул. Университетская, 21, Украина,
e-mail: vsimulik@gmail.com

² Ужгородский национальный университет, инженерно-технический факультет, кафедра
электронных систем, 88000, Ужгород, ул. Капитульная, 13, Украина,
e-mail: taras.zajac@uzhnu.edu.ua

РАЗНООБРАЗИЕ ПОДХОДОВ К ВОПРОСУ О ВЫВОДЕ УРАВНЕНИЯ ДИРАКА

Представлено 26 вариантов вывода уравнения Дирака, которые основываются на разных физических принципах и математических формализмах. Приведено три оригинальные подходы авторов к решению этой задачи: обобщение вывода Г. Саллгофера, получение безмассового уравнения Дирака из уравнений Максвелла в максимально симметричной форме, вывод уравнения Дирака с ненулевой массой из релятивистской квантовой механики дублета фермион-антифермион спинов $s = 1/2$. Положено начало демонстрации роли уравнения Дирака в современной теоретической физике.

Ключевые слова: уравнение Дирака, спинорное поле, квантовая механика, теория поля.

V. M. Simulik¹, T. M. Zajac²

¹Institute of Electron Physics, NAS of Ukraine, 88017, Uzhhorod, 21 Universitetska Str., Ukraine,
e-mail: vsimulik@gmail.com

²Uzhhorod National University, Engineering-Technical Faculty, Department of Electronic Systems, 88000, Uzhhorod, 13 Kapitulna Str., Ukraine,
e-mail: taras.zajac@uzhnu.edu.ua

THE VARIETY OF APPROACHES TO THE PROBLEM OF THE DERIVATION OF DIRAC EQUATION

Purpose. The Dirac equation is one of the fundamental equations of modern theoretical physics. It is in service more than 90 years (1928–2018). The application today is much wider than the areas of quantum mechanics, quantum field theory, atomic and nuclear physics, solid state physics. The successful derivation of some equation of mathematical physics is the first step to successful application. In such process the essence of the corresponding model of nature, the mathematical principles and the physical foundations are visualized. Here we deal with the different approaches to the problem of the Dirac equation derivation.

Methods. The quantum-mechanical, quantum field-theoretical, group-theoretical, algebraic, symmetrical, statistical, stochastic and numerical approaches are used.

Results. The 26 different ways of the Dirac equation derivation are presented. The various physical principles and mathematical formalisms are used. Three original approaches of the authors to the problem are given. They are (i) the generalization of H. Sallhofer derivation, (ii) the obtaining of the massless Dirac equation from the Maxwell equations in maximally symmetrical form, (iii) the derivation of the Dirac equation with nonzero mass from the relativistic quantum mechanics of the fermion-antifermion spin $s = 1/2$ doublet. In some sense the role of the Dirac equation today is demonstrated.

Conclusions. The original investigation of the problem of the Dirac equation derivation is presented. The different approaches, which are based on the various mathematical and physical principles, are considered (26 methods). The

role of the scientists from Uzhhorod is shown. The importance of place of the Dirac equation in modern theoretical physics is discussed.

Keywords: the Dirac equation, spinor field, quantum mechanics, field theory.

REFERENCES

- [1] Dirac, P.A.M. (1958), The principles of quantum mechanics. 4-th ed., Clarendon Press, Oxford, 314 p.
- [2] Sakurai, J. (1967), Advanced quantum mechanics. Addison-Wesley Publishing Company, New York, 335 p.
- [3] Bogoliubov, N.N., Shirkov, D.V. (1980), Introduction to the theory of quantized fields. John Wiley and Sons Inc., New York, 620 p.
- [4] Ryder, L. (1996), Quantum field theory. 2-nd ed., University Press, Cambridge, 487 p.
- [5] Gaioli, F., Alvarez, E. (1995), «Some remarks about intrinsic parity in Ryder's derivation of the Dirac equation», American Journal of Physics, V. 63, No. 2, pp. 177–178.
- [6] Keller, J. (2001), Theory of the electron. A theory of matter from Start. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 257 p.
- [7] Wightman, A. (1960), «Analytic functions of several complex variables», Dispersion relations and elementary particles, John Wiley and Sons Inc., New York, p. 159–221.
- [8] Bargman, V., Wigner, E.P. (1948), «Group theoretical discussion of relativistic wave equations», Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA, V. 34, No. 5, pp. 211–223.
- [9] Foldy, L.L., Wouthuysen, S.A. (1950), «On the Dirac theory of spin 1/2 particles and its non-relativistic limit», Physical Review, V. 78, No. 1, pp. 29–43.
- [10] Feynman, R.P., Hibbs, A.R. (1965), Quantum Mechanics and Path Integrals. McGraw-Hill, New York, 365 p.
- [11] Sallhofer, H. (1986), «Elementary derivation of the Dirac equation X», Zeitschrift für Naturforschung, V. A41, No. 3, pp. 468–470.
- [12] Sallhofer, H. (1990), «Hydrogen in electrodynamics VI, The general solution», Zeitschrift für Naturforschung, V. A45, No. 11–12, pp. 1361–1366.
- [13] Strinivasan, S., Sudarshan, E. (1996), «A direct derivation of the Dirac equation via quaternion measures», Journal of Physics, V. A29, No. 16, pp. 5181–5186.
- [14] Lerner, L. (1996), «Derivation of the Dirac equation from a relativistic representation of spin», European Journal of Physics, V. 17, No. 4, pp. 172–175.
- [15] Krivsky, I.Yu., Simulik, V.M. (2010), «Fermi-Bose duality of the Dirac equation and extended real Clifford-Dirac algebra», Condensed Matter Physics, V. 13, No. 4, pp. 43101(1–15).
- [16] Simulik, V.M., Krivsky, I.Yu., Lamer, I.L. (2013), «Lagrangian for the spinor field in the Foldy-Wouthuysen representation», International Journal of Theoretical and Mathematical Physics, V. 3, No. 4, pp. 109–116.

- [17] Simulik, V.M., Krivsky, I.Yu., Lamer, I.L. (2013), «Bosonic symmetries, solutions and conservation laws for the Dirac equation with nonzero mass», *Ukrainian Journal of Physics*, V. 58, No. 6, pp. 523–533.
- [18] Kubo, T., Ohba, I., Nitta, H. (2001), «A derivation of the Dirac equation in an external field based on the Poisson process», *Physics Letters*, V. A286, No. 4, pp. 227–230.
- [19] Cui, H. (2001), «A method for deriving the Dirac equation from the relativistic Newton's second law», *arXiv:quant-ph/0102114*, available at: <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0102114>
- [20] Ng, Y.J., van Dam, H. (2003), «A geometrical derivation of the Dirac equation», *Physics Letters*, V. 309, No. 5–6, 335–339.
- [21] Calerier, M., Nottale, L. (2003), «A scale relativistic derivation of the Dirac equation», *Electromagnetic Phenomena*, V. 3, No. 1(9), pp. 70–80.
- [22] Evans, M. (2004), «Derivation of Dirac's equation from the Evans wave equation», *Foundation of Physics Letters*, V. 17, No. 2, pp. 149–166.
- [23] Efthimiades, S. (2006), «Physical meaning and derivation of Schrodinger and Dirac equations», *arXiv:quant-ph/0607001*, available at: <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0607001>
- [24] Arminjon, M. (2006), «Dirac equation from the Hamiltonian and the case with a gravitational field», *Foundation of Physics Letters*, V. 19, No. 3, pp. 225–247.
- [25] Santamato, E., de Martini, F. (2013), «Derivation of the Dirac equation by conformal differential geometry», *Foundation of Physics*, V. 43, No. 5, pp. 631–641.
- [26] D'Ariano, G.M., Perinotti, P. (2014), «Derivation of the Dirac equation from principles of information processing», *Physical Review*, V. A90, No. 6, pp. 062106(1-18).
- [27] Simulik, V.M. (1994), «Some algebraic properties of Maxwell-Dirac isomorphism», *Zeitschrift für Naturforschung*, V. A49, No. 11, pp. 1074–1076.
- [28] Simulik, V.M. (1991), «Connection between the symmetry properties of the Dirac and Maxwell equations. Conservation laws», *Theoretical and Mathematical Physics*, V. 87, No. 1, pp. 386–393.
- [29] Keller, J. (1997), «On the electron theory», *Advances in Applied Clifford Algebras*, V. 7, No. Special, pp. 3–26.
- [30] Simulik, V.M., Krivsky, I.Yu. (2002), «Slightly generalized Maxwell classical electrodynamics can be applied to inneratomic phenomena», *Annales de la Fondation Louis de Broglie*, V. 27, No. 2, pp. 303–328.
- [31] Simulik, V.M., Krivsky, I.Yu. (2002), «Relationship between the Maxwell and Dirac equations: symmetries, quantization, models of atom», *Reports on Mathematical Physics*, V. 50, No. 3, pp. 315–328.
- [32] Simulik, V.M., Krivsky, I.Yu. (2003), «Classical electrodynamical aspect of the Dirac equation», *Electromagnetic Phenomena*, V. 3, No. 1(9), pp. 103–114.
- [33] Simulik, V.M., Krivsky, I.Yu. (2013), «Quantum-mechanical description of the fermionic doublet and its link with the Dirac equation», *Ukrainian Journal of Physics*, V. 58, No. 12, pp. 1192–1203.

- [34] Simulik, V.M. (2015) «Derivation of the Dirac and Dirac-like equations of arbitrary spin from the corresponding relativistic canonical quantum mechanics», *Ukrainian Journal of Physics*, V. 60, No. 10, pp. 985–1006.
- [35] Simulik, V.M. (2016), «Link between the relativistic canonical quantum mechanics of arbitrary spin and the corresponding field theory», *Journal of Physics: Conference Series*, V. 670, pp. 012047(1–14).
- [36] Simulik, V.M. (2017), «Relativistic wave equations of arbitrary spin in quantum mechanics and field theory, example spin $s=2$ », *Journal of Physics: Conference Series*, V. 804, pp. 012040(1–10).

©Ужгородський національний університет

УДК 539.186, 539.196
 PACS 34.50.-s; 34.70.+e; 31.15.Gy; 34.80.Dp
 DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.104-115

М.Я. Євич, М.І. Карбованець

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54, Україна,
 e-mail: m.karbovanets@gmail.com

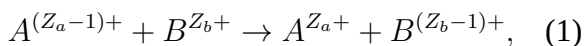
ПЕРЕЗАРЯДКА У ДВІЧІ ЗБУДЖЕНІ СТАНИ ПРИ ПОВІЛЬНИХ ІОН-МОЛЕКУЛЯРНИХ ЗІТКНЕННЯХ

У межах квазікласичного методу обчислено асимптотику (при великих відстанях R між взаємодіючими частинками) потенціалу обмінної взаємодії двоатомної гомоядерної молекули $A^{(Z_a-1)+}$ з атомним іоном $B^{(Z_b-1)+}$, що відповідає за двоелектронний процес одноелектронного захоплення у двічі збуджені іонні стани.

Ключові слова: повільні іон-молекулярні зіткнення, одноелектронне захоплення, двічі збуджені стани, асимптотична теорія.

Вступ

Одно- та багатоелектронні процеси з перерозподілом (перезарядка та іонізація) при повільних зіткненнях іонів B^{Z_b+} з атомами чи молекулами $A^{(Z_a-1)+}$ становлять значний інтерес як для теорії атомних зіткнень, так і для прикладних галузей, таких як фізика плазми, астрофізика та квантова хімія (диви, наприклад, [1,2]). Експериментально і теоретично встановлено [3], що при малих швидкостях зіткнення $v \ll v_0 Z_b^{1/2}$ (v_0 – характерна швидкість валентного електрона в основному стані налітаючого іона B^{Z_b+}) домінуючими є процеси одноелектронного захоплення виду



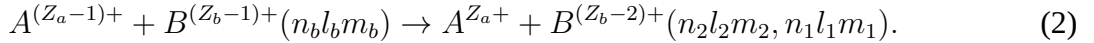
а процеси іонізації менш ймовірні (тут Z_a і Z_b – асимптотичні заряди відповідно молекулярного A^{Z_a+} та атомного B^{Z_b+} залишків). Характерною особливістю цих процесів є те, що електронні переходи між початковим і кінцевим станами відбуваються переважно при великих відстанях R між взаємодіючими частинками у порівнянні з їх розмірами. Ця обставина дозволяє для розрахунку матричних елементів одноелектронної обмінної взаємодії $\Delta E(R)$, що визначає

процес (1), використовувати асимптотичну (за між'ядерною відстанню $R \gg 1$ а.о.) теорію атомних зіткнень. Так, при дослідженні асимптотичними методами процесів одноелектронного захоплення у повільних іон-молекулярних зіткненнях було отримано квазікласичні вирази для спотворених полем віддаленого багатозарядного іона електронних хвильових функцій двоатомної гомоядерної (праці [4,5]) та полярної (праці [6,7]) молекул, які асимптотично точно описують поведінку електрона в підбар'єрній області $r_a \sim r_b \sim R/2$ ($r_{a,b}$ – відстань електрона від частинки $A(B)$). Потенціали обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ були обчислені в [4–7] методом поверхневих інтегралів [1].

Незважаючи на те, що одноелектронні процеси (зокрема, перезарядка (1)), як правило, найбільш ефективні, при теплових енергіях зіткнення настільки ж, а деколи і більш ймовірними виявляються різноманітні двоелектронні процеси. Деякі з них, такі як двоелектронна перезарядка та перезарядка з одночасним збудженням чи іонізацією утвореного іона мішені, теоретично вивчені достатньо повно, в тому числі і асимптотичними методами (диви [8,9]). У той же час для низки інших важливих і

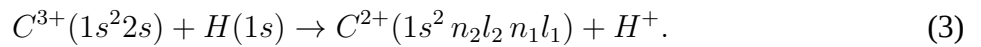
ефективних двоелектронних процесів теорія розроблена в значно меншій мірі і не може претендувати на кількісний опис наявних експериментальних даних. Сказане стосується, насамперед, досліджених в даній робо-

ті двоелектронних процесів одноелектронного захоплення у двічі збуджені іонні стани $|n_2 l_2 m_2, n_1 l_1 m_1\rangle$ при повільних зіткненнях іонів $B^{(Z_b-1)+}$ з двоатомними гомоядерними молекулами $A^{(Z_a-1)+}$:



Необхідність врахування двоелектронних реакцій виду (2) при розрахунку перерізів одноелектронної перезарядки (1) продемонструємо на прикладі процесу селективного

захоплення електрона у певні іонні стани при повільних зіткненнях іонів C^{3+} з атомами гідрогену (диви праці [10, 11] і наведені там посилання):



Експериментально встановлено, що основними каналами процесу (3) є заселення таких станів іона C^{2+} : триплетних станів $(2s3s)^3S$, $(2s3p)^3P$, $(2s3d)^3D$ і синглетних станів $(2s3s)^1S$, $(2p^2)^1S$, $(2s3p)^1P$, $(2p^2)^1D$, $(2s3d)^1D$. Процеси (3) теоретично досліджувалися раніше різними методами, найбільш ґрунтовними з яких є методи молекулярних орбіталей [10] та двоцентрових атомних орбіталей [11]. З точки зору теорії особливо цікавими є двоелектронні процеси захоплення електрона атома гідрогену у двічі збуджені стани $(2p^2)^1S$ та $(2p^2)^1D$ іона C^{2+} , перерізи яких виявилися того ж порядку величини, що і для одноелектронних процесів. Тому базисні набори хвильових функцій в [10, 11] включали, поряд із одноелектронними, і двоелектронні орбіталі, що дозволило описати експериментально спостережувані канали селективного захоплення електронів в реакції (3).

При розробці асимптотичної теорії процесів (2) необхідно враховувати наявні співвідношення між значеннями енергій електрона в початковому E_a і кінцевому E_b станах, тобто в молекулі $A^{(Z_a-1)+}$ та іоні $B^{(Z_b-2)+}$. Тут можливі два випадки: 1) енергії E_a і E_b близькі, $E_a \approx E_b$; 2) значення E_a та E_b сильно відрізняються і $|E_b| > |E_a|$. Для цих двох випадків теорія процесів (2) будується по-різному.

Так, у першому випадку, коли $E_a \approx E_b$, основний внесок у двоелектронну обмінну взаємодію $H_{ab}(R)$, що відповідає за дво-

електронний процес (2), робить конфігурація, коли тунелюючий молекулярний електрон здійснює перехід у міжцентровій області ($r_a \sim R/2 \gg 1$ а.о.), а інший електрон – в околі власного іона $B^{(Z_b-1)+}$ ($r_b \approx 1$ а.о.). Такі корельовані електронні переходи, що призводять до заселення кінцевих двічі збуджених станів іона $B^{(Z_b-2)+}$, можливі лише в результаті міжелектронної взаємодії. Для обчислення матричних елементів обмінної взаємодії $H_{ab}(R)$ при $E_a \approx E_b$ необхідно знати квазімолекулярні хвильові функції тунелюючого електрона у міжцентровій області. Як вказувалося вище, така задача була розв'язана аналітично в працях [4–7]. У даній роботі в межах квазікласичного варіанту асимптотичної теорії [4, 5] обчислено асимптотику двоелектронного матричного елементу $H_{ab}(R)$, що відповідає за корельовану двоелектронну обмінну взаємодію при повільних зіткненнях іонів $B^{(Z_b-1)+}$ з двоатомними гомоядерними молекулами $A^{(Z_a-1)+}$ і призводить до одноелектронного захоплення у двічі збуджені іонні стани в реакції (2) (у випадку $E_a \approx E_b$). Крім цього, нами одержано нове аналітичне зображення для асимптотики одноелектронної обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ двоатомної гомоядерної молекули з багатозарядним йоном у термінах повних еліптичних інтегралів, що узагальнює результат, отриманий в працях [4, 5].

Якщо ж енергії E_a та E_b сильно відрізняються ($|E_b| > |E_a|$), то обидва активні електрони здійснюють непружні корельова-

ні переходи в околі налітаючого іона ($r_a, r_b \approx 1$ а.о.) і для обчислення двоелектронного матричного елементу $H_{ab}(R)$ у цьому випадку необхідно знати хвильову функцію $\Psi_{ab}(\vec{r}_b)$ активного молекулярного електрона в околі чужого іона. Такий випадок буде розглянуто у нашій наступній статті.

У роботі використано атомну систему одиниць ($e^2 = \hbar = m_e = 1$).

Квазімолекулярна хвильова функція та одноелектронна обмінна взаємодія

Орієнтуючись на досліджувану в даній праці задачу, позначимо асимптотичний заряд налітаючого іона в реакції (1) як $(Z_b - 1)$ і розглянемо загальний випадок взаємодії двоатомних гомоядерних молекул $A^{(Z_a-1)+}$ з атомними іонами $B^{(Z_b-1)+}$.

Першим необхідним етапом дослідження асимптотичних властивостей квазімолекулярних систем $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ є знаходження одноелектронних хвильових функцій початкового $\Psi_a(\vec{r}_a)$ і кінцевого $\Psi_b(\vec{r}_b)$ станів у міжцентровій області конфігураційного простору $r_a \sim r_b \sim R/2 \gg 1$ а.о. Як зазначалося у Вступі, така задача досліджувалася в межах асимптотичної теорії в працях [4,5]. Там же було одержано і матричні елементи одноелектронної обмінної взаємодії, що відповідають за процеси захоплення електрона в реакції (1). З метою узгодження позначень для подальшого дослідження варто коротко нагадати схему обчислення одноелектронних квазімолекулярних функцій в міжцентровій області під потенціальним бар'єром, що розділяє взаємодіючі частинки.

Електронний гамільтоніан квазімолекули $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ залежить від трьох параметрів: відстані R від центра мас двоатомної молекули $A^{(Z_a-1)+}$ до іона $B^{(Z_b-1)+}$, відстані d між однаковими ядрами молекулярного іона A^{Z_a+} і кута β між векторами $\vec{d}$ і $\vec{R}$ (рис. 1).

Розглянемо рівняння Шредінгера, що описує рух тунелюючого електрона в аксіально-симетричному потенціалі V_a іона двоатомної молекули A^{Z_a+} та сферично-

симетричному потенціалі V_b атомного іона $B^{(Z_b-1)+}$:

$$\left(-\frac{\Delta}{2} + V_a(r_a) + V_b(r_b) - E\right)\Psi(\vec{r}_a) = 0, \quad (4)$$

де $\Psi(\vec{r}_a)$ та E – відповідно хвильова функція та енергія активного електрона, $\vec{r}_a$ та $\vec{r}_b = \vec{r}_a - \vec{R}$ – радіус-вектори електрона відносно молекулярного іона A^{Z_a+} та атомного іона $B^{(Z_b-1)+}$ (рис. 1). Ефективні потенціали V_a і V_b мають наступну асимптотичну поведінку:

$$\begin{aligned} V_a(r_a) &\xrightarrow{r_a \rightarrow \infty} -\frac{Z_a}{r_a}, \\ V_b(r_b) &\xrightarrow{r_b \rightarrow \infty} -\frac{Z_b - 1}{r_b}. \end{aligned} \quad (5)$$

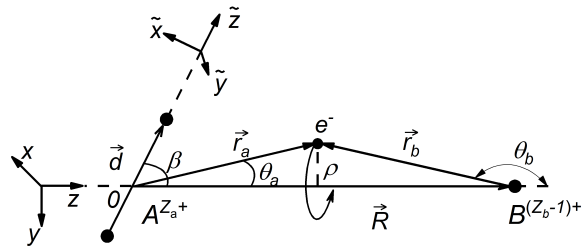


Рис. 1: Геометрія квазімолекули $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ для реакції (1).

Позначимо через E_a збурені рівні енергії у випадку, коли електрон перебуває у зв'язаному стані двоатомної молекули $A^{(Z_a-1)+}$ (квазімолекула $A^{(Z_a-1)+} + B^{(Z_b-1)+}$), та E_b , якщо електрон зв'язаний з атомним іоном $B^{(Z_b-2)+}$ (квазімолекула $A^{Z_a+} + B^{(Z_b-2)+}$).

Будемо розглядати випадок, коли стан тунелюючого молекулярного електрона у полі іонного залишку $B^{(Z_b-1)+}$ невироджений. Знайдемо одноелектронну трицентрову хвильову функцію $\Psi_a(\vec{r}_a)$ у далекій підбар'єрній області, де $r_a \sim R/2$. Вибір систем координат $\{x, y, z\}$ та $\{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}\}$, які використовуються при побудові $\Psi(\vec{r})$, детально описано в працях [4,5] і приведено на рис. 1. Використовуючи в рівнянні (4) асимптотичні вирази (5) для потенціалів V_a і V_b , одержимо

$$\left(\frac{\Delta}{2} + \frac{Z_a}{r_a} + \frac{Z_b - 1}{r_b} + E_a\right)\Psi_a(\vec{r}_a) = 0, \quad (6)$$

де $E_a = E_a^{(0)} - (Z_b - 1)/R + O(1/R^2)$; $E_a^{(0)}$ – незбурена енергія електрона в $A^{(Z_a-1)+}$. Рівняння (6) розв'язуємо з такою граничною умовою:

$$\Psi_a(\vec{r}_a) \xrightarrow{2n_a^2 \ll r_a \ll R} \Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a), \quad (7)$$

$$\Psi_a^{(0)}(\vec{r}_a) \underset{2n_a^2 \ll r_a \ll R}{=} r_a^{Z_a n_a - 1} \exp\left(-\frac{r_a}{n_a}\right) \sum_{s=0,1}^{\infty} \sum_{k=-s+|m_a|}^{s+|m_a|} a_s^{m_a l_a} D_{k m_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0) Y_{s+|m_a|, k}(\theta_a, \phi_a). \quad (8)$$

Тут $D_{mm'}^j(\alpha, \beta, \gamma)$ – функції Вігнера, m_a – проекція орбітального моменту l_a електрона на молекулярну вісь $\vec{d}$, $n_a = (-2E_a^{(0)})^{-1/2}$, а θ_a, ϕ_a – сферичні кути вектора $\vec{r}_a$ в координатній системі $\{x, y, z\}$. Коефіцієнти $a_s^{m_a l_a}$ обчислюють, порівнюючи асимптотику хви-

де нормована власна функція $\Psi_a^{(0)}$ незбуреної двоатомної молекули $A^{(Z_a-1)+}$ в області $1 \text{ а.о.} \ll r_a \ll R$ може бути зображена у вигляді одноцентрової хвильової функції [4, 5]:

льової функції (8) з точною (чисельною) електронною хвильовою функцією (диви [4, 5]).

Квазікласичний розв'язок рівняння (6) для одноелектронної трицентрової хвильової функції $\Psi_a(\vec{r}_a)$ квазімолекули $A^{(Z_a-1)+} + B^{(Z_b-1)+}$ у далекій підбар'єрній області було знайдено в працях [4, 5] і має вигляд:

$$\Psi_a(\vec{r}_a) \underset{r_a \sim R/2}{=} \frac{1}{z \sqrt{n_a p(z)}} \left(\frac{n_a^2 Z_a}{2e}\right)^{n_a Z_a} \exp\left(-\frac{\rho^2 p(z)}{2z}\right) \exp\left(-\int_{z_1}^z p(z') dz'\right) \times \sum_{s=0,1}^{\infty} \sum_{k=-(s+|m_a|)}^{s+|m_a|} a_s^{m_a l_a} D_{k m_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0) Y_{s+|m_a|, k}(\theta_a, \phi_a). \quad (9)$$

Тут $p(z)$ – квазіімпульс при русі електрона в напрямку осі $\vec{R}$:

$$p^2(z) = 2 \left(-|E_a| + \frac{Z_a}{z} + \frac{Z_b - 1}{R - z} \right), \quad (10)$$

z – компонента вектора $\vec{r}_a$ уздовж $\vec{R}$, ρ – відстань від осі $\vec{R}$: $r \approx z + \rho^2/2z + \dots$, $\rho^2 = x^2 + y^2$, $\rho \ll R$, $z \sim R$, а точки повороту $z_{1,2}$ на між'ядерній осі визначаються із умови: $p(z_{1,2}) = 0$.

Використовуючи хвильову функцію (9), неважко одержати вираз для асимптотики одноелектронної трицентрової хвильової функції $\Psi_b(\vec{r}_b)$ квазімолекули $A^{Z_a+} + B^{(Z_b-2)+}$ в міжцентрові області $r_b \sim R/2$. Для цього достатньо у виразі (9) перейти до границі об'єднаних атомів (двоцентрова границя) та виконати наступні заміни: $Z_a \rightarrow Z_b - 1$, $n_a \rightarrow n_b$, $l_a \rightarrow l_b$, $m_a \rightarrow m_b$, $z_1 \rightarrow z_2$, $z \rightarrow z' = R - z$, $\theta_a \rightarrow \pi - \theta_b$, $\phi_a \rightarrow \phi_b$. Результат має вигляд:

$$\Psi_b(\vec{r}_b) \underset{r_b \sim R/2}{\approx} \frac{(-1)^{l_b} B_0}{z' \sqrt{n_b p(z')}} \left(\frac{n_b^2 (Z_b - 1)}{2e}\right)^{n_b (Z_b - 1)} \exp\left(-\frac{\rho^2 p(z')}{2z'}\right) \times \exp\left(\int_{z_2}^{z'} p(z'') dz''\right) Y_{l_b m_b}(\theta_b, \phi_b). \quad (11)$$

Тут $n_b = (-2E_b^{(0)})^{-1/2}$, а B_0 – асимптотичний коефіцієнт хвильової функції валентного електрона в іоні $B^{(Z_b-2)+}$ [12].

Для обчислення одноелектронної обмінної взаємодії $\Delta E(R)$, що визначає процес перезарядки (1), застосуємо метод по-

верхневих інтегралів [1], в якому $\Delta E(R)$ виражається через інтеграл по деякій гіперповерхні $\vec{S}$, що відокремлює області локалізації електрона у початковому Ψ_a та кінцевому Ψ_b станах відповідно квазімолекул $A^{(Z_a-1)+} + B^{(Z_b-1)+}$ та $A^{Z_a+} + B^{(Z_b-2)+}$:

$$\Delta E(R) = \int_{\vec{S}} d\vec{S} (\Psi_a^* \nabla \Psi_b - \Psi_b^* \nabla \Psi_a) \quad (12)$$

$$\Delta E(R) = \frac{(-1)^{l_b} B_0}{\sqrt{n_a n_b}} |m_b|! \left(\frac{n_a^2 Z_a}{2e} \right)^{n_a Z_a} \left(\frac{n_b^2 (Z_b - 1)}{2e} \right)^{n_b (Z_b - 1)} B_{l_b}^{m_b} \left(\frac{R}{2n_a} \right)^{-|m_b| - 1} \times \\ \exp \left(- \int_{z_1}^{z_2} p(z) dz \right) \sum_{s=|m_b|}^{\infty} a_s^{m_a l_a} B_{s+|m_a|}^{m_b} D_{m_b m_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0), \quad (13)$$

де запроваджено позначення:

$$B_l^m = \frac{1}{2^{|m|} m!} \left[\frac{(2l+1)(l+|m|!)}{2(l-|m|!)} \right]^{1/2}. \quad (14)$$

Обчисливши бар'єрний інтеграл $\int_{z_1}^{z_2} p(z) dz$ в (13), надамо обмінній взаємодії $\Delta E(R)$ остаточного вигляду (деталі обчислення бар'єрного інтегралу диві в [7]):

$$\Delta E(R) = \frac{(-1)^{l_b} B_0}{\sqrt{n_a n_b}} |m_b|! \left(\frac{n_a^2 Z_a}{2e} \right)^{n_a Z_a} \left(\frac{n_b^2 (Z_b - 1)}{2e} \right)^{n_b (Z_b - 1)} B_{l_b}^{m_b} \left(\frac{R}{2n_a} \right)^{-|m_b| - 1} \times \\ \exp \left\{ - \frac{1}{n_a \sqrt{(R - z_1) z_2}} \left[(-R^2 + (z_1 + z_2)R - z_1 z_2) K(\zeta) + (R - z_1) z_2 E(\zeta) + \right. \right. \\ \left. \left. (R^2 - (z_1 + 2z_2)R + z_1 z_2 + z_2^2) \Pi(\nu, \zeta) \right] \right\} \sum_{s=|m_b|}^{\infty} a_s^{m_a l_a} B_{s+|m_a|}^{m_b} D_{m_b m_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0). \quad (15)$$

Тут $K(\zeta)$, $E(\zeta)$, $\Pi(\nu, \zeta)$ – повні еліптичні інтеграли відповідно першого, другого та третього роду [7], а параметри ν та ζ визначаються співвідношеннями: $\nu = \frac{z_2 - z_1}{R - z_1}$, $\zeta = \sqrt{\frac{\nu R}{z_2}}$.

Знайдений вираз (15) для асимптотики одноелектронної обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ двоатомної гомоядерної молекули з багатозарядним йоном узагальнює результат, отриманий в працях [4, 5], і переходить в останній, якщо для бар'єрного інтегралу в (13) використати його наближений розклад із [1]. Представлення (15) справедливе за умови, що відстань R між взаємодіючими частинками набагато більша тієї відстані R_0 , при якій зникає потенціальний бар'єр вздовж осі між частинками (тобто, коли точки повороту $z_{1,2}$

У якості поверхні інтегрування $\vec{S}$ в (12) зручно вибрати площину, яка перпендикулярна до між'ядерної осі $\vec{R}$ і проходить через її середину. Використовуючи одержані вище трицентрові хвильові функції (9) і (11) та виконуючи в (12) інтегрування у циліндричних координатах, одержимо:

збігаються).

Одержаний вираз (15) для обмінної взаємодії $\Delta E(R)$ не враховує ефектів переносу імпульсу електрона у реакції (1), які стають особливо відчутними при швидкостях зіткнення $v > 1$ а.о. Вказані ефекти врахуємо, увівши трансляційні фактори (диві, наприклад, [4]), що приводить до «динамічного» потенціалу обмінної взаємодії $\tilde{\Delta E}(R, v)$, який параметрично залежить від швидкості зіткнення v :

$$\tilde{\Delta E}(R, v) = {}_1F_1 \left(|m_b| + 1; 1; -\frac{v_\tau^2 R n_a}{8} \right) \Delta E(R), \quad (16)$$

де ${}_1F_1(\alpha, \beta, z)$ – вироджена гіпергеометрична функція, v_τ – тангенціальна компонента

відносної швидкості зіткнення v , а обмінна взаємодія $\Delta E(R)$ задається виразом (15).

Двоелектронна обмінна взаємодія для перезарядки у двічі збуджені стани

Дослідимо асимптотику електронної частини двоелектронного обмінного матричного елементу $H_{ab}(R)$, який визначає процес (2). Квазімолекулярну систему $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ розглядаємо у двоелектронному наближенні. Вважаємо, що молекулярний A^{Z_a+} та іонний B^{Z_b+} кістяки в реакції (2) містять замкнуті електронні оболонки і не змінюють свого стану в процесі зіткнення. Тоді задача зводиться до дослідження руху двох активних електронів у полі двох іонів: молекулярного – A^{Z_a+} і атомного – B^{Z_b+} (рис. 2).

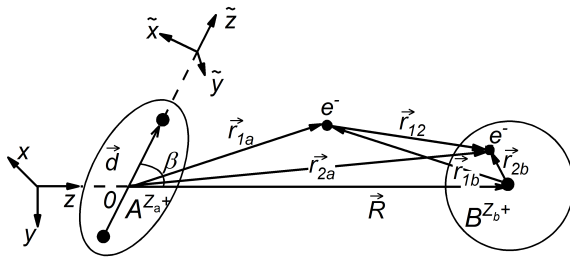


Рис. 2: Геометрія квазімолекули $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ для реакції (2).

У рамках двоелектронного наближення електронний гамільтоніан квазімолекули визначається виразом

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^2 \left[-\frac{\Delta_i}{2} + V_a(r_{ia}) + V_b(r_{ib}) \right] + \frac{1}{r_{12}}, \quad (17)$$

де $\vec{r}_{ia}$ ($\vec{r}_{ib}$) – радіус-вектор i -го електрона відносно центру мас A^{Z_a+} (B^{Z_b+}) ($i = 1, 2$) (див. рис. 2); Δ_i – оператор Лапласа за координатами i -го електрона; r_{12} – відстань між електронами, що здійснюють переходи. Потенціали $V_a(r_{ia})$ і $V_b(r_{ib})$ взаємодії i -го електрона з іонними залишками A^{Z_a+} і B^{Z_b+} мають таку асимптотичну поведінку:

$$V_{a,b}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{Z_{a,b}}{r}. \quad (18)$$

Основною задачею є обчислення матричного елементу $H_{ab}(R)$ двоелектронної обмінної взаємодії, що визначає двоелектронний процес (2). У рамках асимптотичної теорії величина $H_{ab}(R)$ задається співвідношенням [1]:

$$H_{ab}(R) = \langle \Psi_b | \hat{H} | \Psi_a \rangle - \langle \Psi_b | \Psi_a \rangle \langle \Psi_a | \hat{H} | \Psi_a \rangle, \quad (19)$$

де $\Psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ і $\Psi_b(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ – двоелектронні хвильові функції початкового та кінцевого станів квазімолекул $A^{(Z_a-1)+} + B^{(Z_b-1)+}$ та $A^{Z_a+} + B^{(Z_b-2)+}$. Перш за все, знайдемо двоелектронну хвильову функцію Ψ_a , що описує електронну підсистему в початковому стані квазімолекули $A^{(Z_a-1)+} + B^{(Z_b-1)+}$. Позначимо через S сумарний спіновий момент виділеної електронної пари, M_S – його проекцію на вісь Oz , а m_{1a} та m_{2a} – проекції орбітальних моментів активних електронів на цю ж вісь. Тоді симетризована двоелектронна хвильова функція Ψ_a , що описує електронну підсистему в початковому стані, може бути записана у вигляді (у системі координат $\{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}\}$):

$$\Psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{1a} + (-1)^S \Phi_{2a}] \chi_{SM_S}, \quad (20)$$

де χ_{SM_S} – спінова двоелектронна функція, $\Phi_{1a}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ і $\Phi_{2a}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \Phi_{1a}(\vec{r}_1 \leftrightarrow \vec{r}_2)$ – двоелектронні координатні хвильові функції початкового стану.

Перейдемо до побудови двоелектронної хвильової функції кінцевого стану Ψ_b . Позначимо через $l_1 m_1$, $l_2 m_2$ орбітальні моменти і їх проекції на міжцентрову вісь $\vec{R}$ електронів у кінцевому (двічі збудженому) стані іона $B^{(Z_b-2)+}$. Нехай L , S – їх повний орбітальний і спіновий моменти, а M_L і M_S – відповідні їм проекції на вісь $\vec{R}$. Тоді хвильова функція Ψ_b у схемі LS -зв'язку має вид (у системі координат $\{x, y, z\}$):

$$\Psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m_1, m_2} C_{l_1 m_1, l_2 m_2}^{LM_L} \times [\Phi_{1b} + (-1)^S \Phi_{2b}] \chi_{SM_S}, \quad (21)$$

де $\Phi_{1b}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ і $\Phi_{2b}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \Phi_{1b}(\vec{r}_1 \leftrightarrow \vec{r}_2)$ – двоелектронні координатні хвильові функції кінцевого стану, $C_{l_1 m_1, l_2 m_2}^{LM_L}$ – коефіцієнти Клебша-Гордона.

Оскільки активні електрони здійснюють переходи на великих відстанях $\sim R/2 \gg 1$ а.о., двоелектронні хвильові функції $\Phi_{1a}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ і $\Phi_{1b}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ можна зобразити у вигляді добутку одноелектронних функцій, які не враховують кореляційну взаємодію між електронами:

$$\Phi_{1a}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_a(\vec{r}_{1a}) \varphi_i(\vec{r}_{2b}) \quad (22)$$

$$\Phi_{1b}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_{f_1}(\vec{r}_{1b}) \varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b}), \quad (23)$$

де $\varphi_a(\vec{r}_{1a})$ – хвильова функція тунелюючого електрона молекули $A^{(Z_a-1)+}$, $\varphi_i(\vec{r}_{2b})$ – електронна хвильова функція основного стану іона $B^{(Z_b-1)+}$, $\varphi_{f_1}(\vec{r}_{1b})$ і $\varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b})$ – одно-

електронні хвильові функції двічі збуджених станів іона $B^{(Z_b-2)+}$. Функції $\varphi_a(\vec{r}_{1a})$ та $\varphi_{f_1}(\vec{r}_{1b})$ є хвильовими функціями тунелюючого електрона у початковому і кінцевому станах, які потрібно знати у міжцентровій області, тобто для $r_{1a} \approx r_{1b} \approx R/2$. При обчисленні $H_{ab}(R)$ у якості $\varphi_a(\vec{r}_{1a})$ та $\varphi_{f_1}(\vec{r}_{1b})$ ми візьмемо знайдені вище функції (9) та (11). При цьому в функції (11) замінимо $(n_b, l_b, m_b) \rightarrow (n_1, l_1, m_1)$.

Підставивши співвідношення (20) – (23) у вираз (19), для матричного елемента двоелектронної обмінної взаємодії $H_{ab}(R)$ одержимо таке представлення:

$$H_{ab}(R) = \sum_{m_1, m_2} C_{l_1 m_1, l_2 m_2}^{L M_L} [H_1(R) + (-1)^S H_2(R)], \quad (24)$$

$$H_1(R) = \left\langle \varphi_{f_1}(\vec{r}_{1b}) \varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b}) \left| \hat{H} \right| \varphi_a(\vec{r}_{1a}) \varphi_i(\vec{r}_{2b}) \right\rangle, \quad (25)$$

$$H_2(R) = \left\langle \varphi_{f_2}(\vec{r}_{1b}) \varphi_{f_1}(\vec{r}_{2b}) \left| \hat{H} \right| \varphi_a(\vec{r}_{1a}) \varphi_i(\vec{r}_{2b}) \right\rangle. \quad (26)$$

Для синглетних двоелектронних іонних станів $|n_2 l_2 m_2, n_1 l_1 m_1\rangle$ значення спіну виділеної електронної пари $S = 0$, а для триплетних – $S = 1$. Оскільки хвильові функції $\varphi_i(\vec{r}_{2b})$ та $\varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b})$ ортогональні як власні функції одного і того ж гамільтоніана, то в матричних елементах $H_1(R)$, $H_2(R)$ ненульовий внесок робить лише міжелектронна взаємодія. Позаяк активні електрони здійснюють переходи на великих відстанях $r_{12} = |\vec{R} - \vec{r}_{1a} + \vec{r}_{2b}| \approx R/2 \gg 1$ а.о., розкладемо потенціал їх взаємодії r_{12}^{-1} в ряд за обернени-

ми степенями великого $|\vec{R} - \vec{r}_{1a}| \gg 1$ а.о., обмежившись при цьому першим кореляційним членом:

$$\frac{1}{r_{12}} \approx -\frac{r_{2b} \cos \theta}{|\vec{R} - \vec{r}_{1a}|^2} \approx -\frac{4r_{2b} \cos \theta}{R^2}$$

(θ – кут між векторами $\vec{r}_{1b} = \vec{R} - \vec{r}_{1a}$ та $\vec{r}_{2b}$). Враховуючи сказане та записавши інтеграл по $\vec{r}_{1b}$ у циліндричних координатах, для матричного елемента (25) одержимо:

$$H_1(R) = -4 \int_0^{R/2} dz \int_{\vec{S}} d\vec{S} \varphi_{f_1}^*(\vec{r}_{1b}) \varphi_a(\vec{r}_{1a}) \frac{1}{R^2} \int d\vec{r}_{2b} \varphi_{f_2}^*(\vec{r}_{2b}) \varphi_i(\vec{r}_{2b}) r_{2b} \cos \theta. \quad (27)$$

У виразі (27) поверхня інтегрування $\vec{S}$ – площа, яка перпендикулярна до між'ядерної осі $\vec{R}$ і ділить її навпіл. Водночас інтегрування за змінною $\vec{r}_{2b}$ в (27) проводиться по всьому простору. Подібне до (27) представлення одержується і для матричного елемента $H_2(R)$ в (26).

Для подальших обчислень необхідно конкретизувати хвильові функції $\varphi_i(\vec{r}_{2b})$ та

$\varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b})$. Вони задовольняють рівняння Шредінгера

$$\left(-\frac{\Delta_2}{2} + V_b(r_{2b}) - E_{i,f_2} \right) \varphi_{i,f_2}(\vec{r}_{2b}) = 0, \quad (28)$$

у якому ми знехтували потенціалом взаємодії $V_a(r_{2a})$ внутрішнього електрона іона $B^{(Z_b-2)+}$ з віддаленим молекулярним іоном A^{Z_a+} у порівнянні з $V_b(r_{2b})$. Взаємодію еле-

ктрона з іонним залишком B^{Z_b+} опишемо таким модельним потенціалом $V_b(r_{2b})$ [13]:

$$V_b(r_{2b}) = -\frac{Z_b}{r_{2b}} + \sum_{l'} C_{l'} \frac{1}{r_{2b}^2} \hat{P}_{l'}, \quad (29)$$

де $\hat{P}_{l'}$ – оператор проектування на підпростір сферичних функцій із заданим значенням орбітального квантового числа l' . Нормована хвильова функція електрона у основному стані іона $B^{(Z_b-1)+}$ для модельного потенціалу (29) має вигляд [14]:

$$\varphi_i(\vec{r}_{2b}) = B_1 r_{2b}^{s_{l_b}} e^{-\frac{r_{2b}}{n_b}} Y_{l_b m_b}(\theta_{2b}, \phi_{2b}), \quad (30)$$

де

$$B_1 = \left(\frac{2}{n_b}\right)^{s_{l_b}+3/2} \frac{1}{\Gamma^{1/2}(2s_{l_b}+3)} \quad (31)$$

($\Gamma(x)$ – гамма-функція Ейлера).

Нормована хвильова функція збудженого стану $\varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b})$ іона $B^{(Z_b-1)+}$ для модельного потенціалу (29) має вигляд [15]:

$$\varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b}) = B_2 r_{2b}^{s_{l_2}} e^{-\frac{r_{2b}}{n_2}} {}_1F_1\left(-p; 2s_{l_2}+2; \frac{2r_{2b}}{n_2}\right) Y_{l_2 m_2}(\theta_{2b}, \phi_{2b}), \quad (32)$$

$$B_2 = \left(\frac{2}{n_2}\right)^{s_{l_2}+2} \frac{1}{2Z_b^{1/2} \Gamma^{1/2}(2s_{l_2}+2)} \left[\frac{\Gamma(n_2 Z_b + 2s_{l_2} + 1)}{(n_2 Z_b - s_{l_2} - 1)!} \right]^{1/2}. \quad (33)$$

Тут $p = (n_2 Z_b - s_{l_2} - 1)$ – ціле додатне число (для основного стану $p = 0$).

Для знаходження шуканого представлення для двоелектронного матричного елемента двоелектронної взаємодії $H_{ab}(R)$ обчислимо інтеграли $H_1(R)$, $H_2(R)$ в (25), (26), використовуючи знайдені зображен-

ня для одноелектронних хвильових функцій $\varphi_a(\vec{r}_{1a})$, $\varphi_{f_1}(\vec{r}_{1b})$, $\varphi_i(\vec{r}_{2b})$ та $\varphi_{f_2}(\vec{r}_{2b})$. Підставивши в інтеграли (27) вирази (9), (11), (30) і (32) та виконуючи інтегрування за змінними $\vec{r}_{1a}$ (у циліндричних координатах) та $\vec{r}_{2b}$ (у сферичних координатах), для матричного елемента $H_1(R)$ одержимо:

$$\begin{aligned} H_1(R) = & (-1)^{l_1} B_0 B_1 B_2 B_{l_1}^{m_1} \frac{1}{R} \left(\frac{2n_a}{R}\right)^{|m_1|+1} m_1! \left(\frac{n_a^2 Z_a}{2e}\right)^{n_a Z_a} \left(\frac{n_2^2 (Z_b - 1)}{2e}\right)^{n_2 (Z_b - 1)} \times \\ & \sqrt{(2l_b + 1)(2l_2 + 1)} \begin{pmatrix} l_b & l_2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_b & l_2 & 1 \\ m_b & m_2 & 0 \end{pmatrix} \left(\frac{n_2 n_b}{n_2 + n_b}\right)^{s_{l_2} + s_{l_b} + 4} \times \\ & \Gamma(s_{l_2} + s_{l_b} + 4) \cdot {}_2F_1\left(-n_2 Z_b + s_{l_2} + 1; s_{l_2} + s_{l_b} + 4; 2s_{l_2} + 2; \frac{2n_b}{n_2 + n_b}\right) \times \\ & \exp\left\{-\frac{1}{n_a \sqrt{(R - z_1)z_2}} \left[(-R^2 + (z_1 + z_2)R - z_1 z_2) K(\zeta) + (R - z_1)z_2 E(\zeta) + \right.\right. \\ & \left.\left.(R^2 - (z_1 + 2z_2)R + z_1 z_2 + z_2^2) \Pi(\nu, \zeta)\right]\right\} \sum_{s=|m_1|}^{\infty} a_s^{m_a l_a} B_{s+|m_a|}^{m_1} D_{m_1 m_a}^{s+|m_a|}(0, \beta, 0). \quad (34) \end{aligned}$$

Тут ${}_2F_1(\alpha; \beta; \gamma; z)$ – гіпергеометрична функція; $\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}$ – $3j$ -символ Вігнера; s_{l_b} , s_{l_2} – ефективні орбітальні квантові числа для модельного потенціалу (29) (їх обчислення детально описано в [9]). Величини $B_{l_1}^{m_1}$ та $B_{s+|m_a|}^{m_1}$ визначаються формулою (14). Матричний елемент $H_2(R)$ можна одержати із виразу (34) для $H_1(R)$, виконавши в остан-

ньому заміни: $n_{1b} \leftrightarrow n_{2b}$; $l_1 \leftrightarrow l_2$; $m_1 \leftrightarrow m_2$.

Висновки

У статті розроблено квазікласичну версію асимптотичної теорії для дослідження двоелектронних процесів одноелектронної перезарядки з утворенням двічі збуджених іон-

них станів при повільних іон-молекулярних зіткненнях. Одержано нові аналітичні представлення (24), (34) для асимптотики матричного елемента двоелектронної обмінної взаємодії іонів з двоатомними гомоядерними молекулами в реакції (2) у випадку близьких енергій E_a та E_b тунелюючого електрона у початковому та кінцевому станах, тобто в молекулі $A^{(Z_a-1)+}$ та іоні $B^{(Z_b-2)+}$.

Знайдене представлення для матричного елемента обмінної взаємодії $H_{ab}(R)$, що описує двоелектронний процес одноеле-

ктронного захоплення у двічі збуджені іонні стани в реакціях (2) (формули (24), (34)), є доволі простим і зручним для систематичних розрахунків перерізів процесів з перерозподілом виду (2). Розвиненню запропонованого в цій праці підходу на випадок, коли вказані енергії E_a та E_b сильно відрізняються ($|E_a| > |E_b|$), а також обчисленню повних і парціальних перерізів одно- та двоелектронних процесів типу (1) і (2) присвячені наші подальші дослідження.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Chibisov M. I. Asymptotic exchange interactions in ion-atom systems / M. I. Chibisov, R. K. Janev // *Phys. Rep.* – 1988. – V. 166. – № 1. – P. 1–87.
- [2] Scott T. C. Asymptotically exact calculation of the exchange energies of one-active-electron diatomic ions with the surface integral method / T. C. Scott, M. Aubert-Frecon, G. Haderinger *et. al.* // *J. Phys. B.* – 2004. – V. 37. – P. 4451–4469.
- [3] Bransden B. H. Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions / B. H. Bransden, M. H. C. McDowell. – Oxford: Clarendon, 1992. – 488 p.
- [4] Khoma M. V. On the semiclassical approach in the theory of ion-diatom exchange interaction: its application to charge exchange reactions / M. V. Khoma, O. M. Karbovanets, M. I. Karbovanets, R. J. Buenker // *Physica Scripta.* – 2008. – V. 78. – P. 065201 (10pp).
- [5] Карбованець О. М. Квазікласичний підхід в теорії обмінної взаємодії багатозарядних іонів з двоатомними молекулами / О. М. Карбованець // *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика.* – 2008. – № 23. – С. 7–15.
- [6] Khoma M. V. A simple theoretical approach of charge transfer processes in collisions of atomic ions with polar targets / M. V. Khoma, M. Imai, O. M. Karbovanets *et. al.* // *Chemical Physics.* – 2008. – V. 352. – P. 142–146.
- [7] Карбованець О. М. Метод поверхневих інтегралів в теорії обмінної взаємодії полярних молекул з багатозарядним йоном / О. М. Карбованець, М. І. Карбованець, В. Ю. Лазур, М. В. Хома // *ЖФД.* – 2010. – Т. 14. – № 4. – P. 4301 (11 с.).
- [8] Khoma M. V. Asymptotic theory of the one- and two-electron processes in slow collisions of atomic ions with diatomic molecules / M. V. Khoma, V. Yu. Lazur, R. K. Janev // *Phys. Rev. A.* – 2009. – V. 80. – P. 032706 (1–20).
- [9] Karbovanets O. M. Two-electron exchange interaction between polar molecules and atomic ions. Asymptotic approach / O. M. Karbovanets, M. I. Karbovanets, M. V. Khoma, V. Yu. Lazur // *European Physical Journal D.* – 2015. – V. 69. – P. 94 (1–10).
- [10] Errea L. F. Charge exchange and exi-tation in $C^{3+} + H$ collisions: II. Partial and total cross section calculations / L. F. Errea, B. Herrero, L. Mendez, A. Riera // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1991. – V. 24. – P. 4061–4075.

- [11] Tseng H. C. Total and state-selective electron capture cross sections for $C^{3+} + H$ collisions / H. C. Tseng, C. D. Lin // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. — 1999. — V. 32. — P. 5271–5278.
- [12] Chibisov M. I. Charge exchange of atoms on multiply charged ions / M. I. Chibisov // JETP. — 1979. — V. 49. — No. 6. — P. 962–966.
- [13] Simons G. New model potential for pseudopotential calculation / G. Simons // J. Chem. Phys. — 1971. — V. 55. — No. 2. — P. 756–761.
- [14] Лендъел В. И. Введение в теорию атомных столкновений / В. И. Лендъел, В. Ю. Лазур, М. И. Карбованец, Р. К. Янев. — Львов : Выща школа, 1989. — 192 с.
- [15] Ивакин И. А. Перезарядка с возбуждением иона: Асимптотическая теория / И. А. Ивакин, М. И. Карбованец, В. Н. Островский // Оптика и спектроскопия. — 1987. — Т. 63. — Вып. 3. — С. 494–500.

Стаття надійшла до редакції 25.06.2019

М.Я. Евич, М.И. Карбованец

Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54, Украина

ПЕРЕЗАРЯДКА В ДВАЖДЫ ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ ПРИ МЕДЛЕННЫХ ИОН-МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

В рамках квазиклассического метода вычислено асимптотику (при больших расстояниях R между сталкивающимися частицами) потенциала обменного взаимодействия двухатомной гомоядерной молекулы $A^{(Z_a-1)+}$ с атомным ионом $B^{(Z_b-1)+}$, ответственного за двухэлектронный процесс одноэлектронного захвата в дважды возбужденные ионные состояния.

Ключевые слова: медленные ион-молекулярные столкновения, одноэлектронный захват, дважды возбужденные состояния, асимптотическая теория.

М. Ya. Yevych, M. I. Karbovanets

Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin, 54, Ukraine

CHARGE-TRANSFER PROCESSES INTO DOUBLY EXCITED STATES IN A SLOW ION-MOLECULE COLLISIONS

Purpose. To construct a closed analytical expression for the two-electron exchange interaction potential, which define the charge transfer processes into the doubly excited states in collisions of the homonuclear diatomic molecules with multicharged ions.

Methods. The semiclassical method and the asymptotic version of the surface integral method have been used for construction of the asymptotically correct two-center wave function and the two-electron exchange interaction.

Results. We have constructed the semiclassical representation for the two-center electronic wave function of the quasimolecular systems, which consist of the homonuclear diatomic molecule and atomic ion, for the region of a large separation between heavy particles. The analytical expression (in terms of full elliptic integrals) of the asymptotic of a two-electron exchange interaction responsible for the formation of doubly excited ionic states has been obtained.

Conclusions. An analytical study of the asymptotic properties (at large distances between interacting particles) of the quasimolecular system that consists of an ion and a homonuclear diatomic molecule has been carried out. The new analytical expression for the leading term of the two-electron exchange interaction responsible for capture into the doubly excited states has been obtained in the framework of the semiclassical version of the asymptotic approach. It is assumed that the energies of the tunneling electron before and after the recharge process are not much different. The expressions obtained for exchange interaction can be used for the study of the two-electron transfer processes into a doubly excited state at the collision of a homonuclear diatomic molecule with an atomic ion.

Keywords: slow ion-molecule collisions, charge transfer, doubly excited states, asymptotic theory.

REFERENCES

- [1] Chibisov, M. I., Janev, R. K. (1988), «Asymptotic exchange interactions in ion-atom systems», *Phys. Rep.*, V. 166, No. 1, pp. 1–87.
- [2] Scott, T. C., Aubert-Frecon, M., Hadinger, G., Andrae, D. (2004), «Asymptotically exact calculation of the exchange energies of one-active-electron diatomic ions with the surface integral method», *J. Phys. B.*, V. 37, pp. 4451–4469.
- [3] Bransden, B. H., McDowell, M. H. C. (1992), *Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions*, Oxford, Clarendon, 488 p.
- [4] Khoma, M. V., Karbovanets, O. M., Karbovanets, M. I., Buenker, R. J. (2008), «On the semiclassical approach in the theory of ion-diatom exchange interaction: its application to charge exchange reactions», *Physica Scripta*, V. 78, pp. 065201 (10).
- [5] Karbovanets, O. M. (2008), «Quasiclassical approach in the theory of exchange interaction of multiply charged ions with diatomic molecules», [*«Kvaziklasychnyi pidkhid v teorii obminnoi vzaємodii bahatozariadnykh ioniv z dvoatomnyy molekuly»*], *Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Physics [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fiz.]*, Iss. 23, pp. 7–15.
- [6] Khoma, M. V., Imai, M., Kikuchi, Y., Saito, M., Haruyama, Y., Karbovanets, M. I., Kretinin, I. Yu., Itoh, A., Buenker, R. J. (2008), «A simple theoretical approach of charge transfer processes in collisions of atomic ions with polar targets», *Chemical Physics*, V. 352, pp. 142–146.
- [7] Karbovanets, O. M., Karbovanets, M. I., Lazur, V. Yu., Khoma, M. V. (2010), «The method of surface integrals in the theory of exchange interaction of polar molecules with multiply charged ions», [*«Metod poverkhnevyykh intehraliv v teorii obminnoi vzaємodii poliarnykh molekul z bahatozariadnyy yonamy»*], *J. Phys. Studies*, V. 14, No. 4, pp. 4301.
- [8] Khoma, M. V., Lazur, V. Yu., Janev, R. K. (2009), «Asymptotic theory of the one- and two-electron processes in slow collisions of atomic ions with diatomic molecules», *Phys. Rev. A.*, V. 80, pp. 032706.
- [9] Karbovanets, O. M., Karbovanets, M. I., Khoma, M. V., Lazur, V. Yu. (2015), «Two-electron exchange interaction between polar molecules and atomic ions. Asymptotic approach», *European Physical Journal D*, V. 69, pp. 94 (1–10).

- [10] Errea, L. F., Herrero, B., Mendez, L., Riera, A. (1991), «Charge exchange and excitation in $C^{3+} + H$ collisions: II. Partial and total cross section calculations», J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., V. 24, pp. 4061–4075.
- [11] Tseng, H. C., Lin, C. D. (1999), «Total and state-selective electron capture cross sections for $C^{3+} + H$ collisions», J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., V. 32, pp. 5271–5278.
- [12] Chibisov, M. I. (1979), «Charge exchange of atoms on multiply charged ions», JETP, V. 49, No. 6, pp. 962–966.
- [13] Simons, G. (1971), «New model potential for pseudopotential calculation», J. Chem. Phys., V. 55, № 2, pp. 756–761.
- [14] Lendel, V. I., Lazur, V. Yu., Karbovanets, M. I., Yanev, R. K. (1989), Introduction to the theory of atomic collisions, [Vvedeniye v teoriyu atomnykh stolknoveniy], Lviv, [L'viv : Vyshcha shkola], 192 p.
- [15] Ivakin, I. A., Karbovanets, M. I., Ostrovsky, V. N. (1987), «Charge exchange with ion excitation: asymptotic theory», Opt. Spectrosc., V. 63, pp. 288–292.

©Ужгородський національний університет

УДК 539.122; 537.8
PACS 11.10.-z, 41.20.-q, 41.20.Jb
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.116-124

В. М. Симулик¹, Т. М. Заяць²

¹Інститут електронної фізики НАН України, 88017, Ужгород, вул. Університетська, 21, Україна, e-mail: vsimulik@gmail.com

²Ужгородський національний університет, Інженерно-технічний факультет, кафедра електронних систем, 88000, Ужгород, вул. Капітульна, 13, Україна, e-mail: taras.zajac@uzhnu.edu.ua

ОПИС ПОЗДОВЖНИХ ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ХВИЛЬ РІВНЯННЯМИ МАКСВЕЛЛА

Поздовжні електромагнітно-скалярні хвилі одержано у якості розв'язку узагальненої системи рівнянь Максвелла, яка є максимально симетричною формою цих рівнянь. Особливо важливим результатом є отримання поздовжніх електричної і скалярної хвиль у якості безпосереднього розв'язку стандартної системи рівнянь Максвелла з густинами струмів і зарядів градієнтного типу. Представлено строге математичне доведення, що поздовжні електрична і скалярна хвилі існують у околі струмів і зарядів, які їх породжують. Вказано на можливість застосування отриманих результатів до фізичної інтерпретації сучасних експериментів, у яких реєструються поздовжні електромагнітні хвилі.

Ключові слова: рівняння Максвелла, електромагнітне поле, класична електродинаміка, поздовжні електромагнітні хвилі.

Вступ

Дослідження проблематики поздовжніх електромагнітних хвиль беруть початок від Ніколи Тесли. Це майже очевидно [1], хоча з різних причин сьогодні складно відокремити легенди про Н. Теслу від його фактичних результатів щодо передачі електромагнітної енергії на відстань [2].

Перша відома теоретична робота про поздовжні електромагнітні хвилі [3] з'явилася у далекому 1941 р. Більш сучасне теоретичне обґрунтування існування таких хвиль [4] спиралось на зв'язок рівнянь Максвелла з безмасовим рівнянням Дірака, а для останнього існування поздовжніх компонент у загальному розв'язку є очевидним. Старт у [4] певною мірою завдячує результатам [5], де визначено відповідності між розв'язками, симетріями, лагранжіанами та законами збереження безмасового спірного поля та електромагнітного поля у термінах напруженостей електричного $\vec{E}$ і магнітного $\vec{H}$ полів.

Безпосередньо проблемі існування по-

здовжніх електромагнітних хвиль були присвячена робота [6], а також публікації [7] і [8]. Одна з ідей полягала у використанні для цієї мети певним чином узагальнених рівнянь Максвелла [9] введених у розгляд на основі принципу максимально можливої симетрії [10], див., наприклад, [11], а також на основі зв'язку з рівнянням Дірака, як для випадку, коли маса $m = 0$ [9–11], так і для загального випадку ненульової маси [12] і [13]. Нагадаємо, що Дж. К. Максвелл вивів свою систему рівнянь для опису електромагнітних явищ на основі узагальненого запису всіх відомих законів електродинаміки Фарадея, Ампера, Вебера і т.д. і застосування принципу симетрії. По аналогії з ідеями Максвелла у [9–11] використана можливо найбільш симетрична форма рівнянь Максвелла, що має 256 вимірну алгебру інваріантності.

У роботах [6–8] поздовжні електромагнітні хвилі розглядалися також і у рамках стандартних рівнянь Максвелла, але у цьому випадку була виявлена лише поздовжня компонента вектора напруженості електрично-

го поля $\vec{E}$ і скалярна хвиля, напрямок розповсюдження якої співпадає із згаданою поздовжньою компонентою $\vec{E}$.

Сьогодні у порівнянні з часами [5–7] інтерес до проблематики поздовжніх електромагнітних хвиль надзвичайно виріс. Перш за все слід відмітити реєстрацію поздовжньої електричної хвилі у експериментах з лазерними пучками. Радіально поляризовані пучки світла реєструвались у [14] і [15]. У роботі [16] отримано інтенсивні поздовжні електричні поля генеровані з поперечних електромагнітних хвиль, а у статті [17] досліджено генерацію поляризаційно-неоднорідних мод у потужному CO₂-лазері.

Сучасні твердження про поздовжні електромагнітні хвилі у плазмі наведені, наприклад, у [18] і [19], у плазмонах – у [20], у металах і на поверхні металів – у [21].

З іншого боку, твердження про існування поздовжніх електромагнітних хвиль певним чином конфліктує з канонами класичної електродинаміки Максвелла. Одна з наших цілей – довести строго математично, що насправді жодного протиріччя не існує.

Відомо, що розв’язок вільних рівнянь Максвелла, тобто електромагнітна хвиля на асимптотичі, містить лише поперечні компоненти векторів напруженостей електричного $\vec{E}$ та магнітного $\vec{H}$ полів. Але при цьому забувають, що, на відміну від вільних рівнянь Максвелла, знаходження розв’язків системи рівнянь Максвелла у неоднорідному середовищі при наявності струмів і зарядів є зовсім іншою і аж ніяк не простою задачею. Сьогодні дослідники все частіше стверджують, що у таких випадках існування поздовжніх електромагнітних хвиль не суперечить канонам електродинаміки Максвелла. Щоб узгодити останнє твердження з очевидною (експеримент плюс теорія) поперечністю електромагнітного поля на асимптотичі у сучасній літературі все частіше робиться твердження, відоме ще з [6–8], про існування поздовжніх електромагнітних хвиль лише у околі струмів і зарядів, які є джерелами електромагнітного поля. Якщо заряд великий, наприклад, планета Земля у цілому, то поздовжня електромагнітна хвиля (або лише її електрична компонента) цілком може мати розміри, на-

приклад, від міста Нью-Йорк до району річки Підкамінна Тунгуска!

Автори роботи [22] заявили, що їм вдалося зареєструвати поздовжні електромагнітні хвилі. У дискусії, яка зав’язалася, результат [22], як правило, піддається сумнівам. Наприклад, автор [23] доводить, що у експерименті [22] кулеподібною антеною реєструвались класичні поперечні TEM хвилі, породжені струмами, пов’язаними з планетою Земля.

Актуальність засосування методів математичної фізики у галузі вивчення поздовжніх електромагнітних хвиль є очевидною. Нижче представляємо продовження започаткованих у [6–8] досліджень.

Мінімум необхідних позначень

Система одиниць $\hbar = c = 1$. Метрика $g = (g^{\mu\nu}) = (+ - - -)$, $a^\mu = g^{\mu\nu}a_\nu$, по індексу, що повторюється двічі, – сумування, $\mu = \overline{0, 3}$, $j = 1, 2, 3$; $M(1, 3) = \{x \equiv (x^\mu) = (x^0 = t, \vec{x} \equiv (x^j))\}$ – простір-час Мінковського. Математична коректність застосування методу Фур’є забезпечується використанням оснащеного простору Гільберта $S^{4,4} \subset H^{4,4} \subset S^{4,4*}$. Тут $S^{4,4}$ – простір основних функцій Шварца, а $S^{4,4*}$ – простір узагальнених функцій Шварца. Зауважимо, що у квантово-механічних теоріях, де часова змінна відіграє роль параметра, слід використовувати простір $S^{3,4} \subset H^{3,4} \subset S^{3,4*}$, однак у формалізмі явно коваріантної теорії поля оснащений простір Гільберта вибираємо у вигляді $S^{4,4} \subset H^{4,4} \subset S^{4,4*}$.

Поздовжні електромагнітні хвилі в узагальнених рівняннях Максвелла.

Розглянемо таку узагальнену широко-симетричну систему рівнянь Максвелла

$$\begin{aligned} \partial_0 \vec{E} - \text{curl} \vec{H} &= -\text{grad} E^0, \\ \partial_0 \vec{H} + \text{curl} \vec{E} &= -\text{grad} H^0, \\ \text{div} \vec{E} &= -\partial_0 E^0, \quad \text{div} \vec{H} = -\partial_0 H^0. \end{aligned} \quad (1)$$

у якій густини струму і заряду (у тому числі і магнітні) мають вигляд

$$\begin{aligned}\vec{j}(x) &= -\text{grad} E^0(x), \\ \rho(x) &= -\partial_0 E^0(x), \\ \vec{j}_{\text{mag}}(x) &= -\text{grad} H^0(x), \\ \rho_{\text{mag}}(x) &= -\partial_0 H^0(x).\end{aligned}\quad (2)$$

Розв'язок узагальненої системи рівнянь Максвелла (1) шукаємо методом Фур'є, тобто у вигляді інтегралу Фур'є. Кінцево цей розв'язок має вигляд:

$$\begin{aligned}\vec{E}(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k \sqrt{\frac{\omega}{2}} \{ [c_k^1 \vec{e}_1 + c_k^2 \vec{e}_2 + (c_k^3 + c_k^4) \vec{e}_3] e^{-ikx} + A \}, \\ A &\equiv [c_k^{*1} \vec{e}_1^* + c_k^{*2} \vec{e}_2^* + (c_k^{*3} + c_k^{*4}) \vec{e}_3^*] e^{ikx}, \\ \vec{H}(x) &= \frac{i}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k \sqrt{\frac{\omega}{2}} \{ [c_k^1 \vec{e}_1 - c_k^2 \vec{e}_2 + (c_k^3 - c_k^4) \vec{e}_3] e^{-ikx} - B \}, \\ B &\equiv [c_k^{*1} \vec{e}_1^* - c_k^{*2} \vec{e}_2^* + (c_k^{*3} - c_k^{*4}) \vec{e}_3^*] e^{ikx}, \\ E^0(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k \sqrt{\frac{\omega}{2}} [(c_k^3 + c_k^4) e^{-ikx} + (c_k^{*3} + c_k^{*4}) e^{ikx}], \\ H^0(x) &= \frac{i}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k \sqrt{\frac{\omega}{2}} [(c_k^3 - c_k^4) e^{-ikx} - (c_k^{*3} - c_k^{*4}) e^{ikx}].\end{aligned}\quad (3)$$

У (3) використано наступні позначення:

$$\begin{aligned}kx &\equiv \omega t - \vec{k}\vec{x}, \quad \omega \equiv \sqrt{k^2}, \\ \vec{e}_1 &= \frac{1}{\omega \sqrt{2(k^1 k^1 + k^2 k^2)}} \begin{vmatrix} \omega k^2 - i k^1 k^3 \\ -\omega k^1 - i k^2 k^3 \\ i(k^1 k^1 + k^2 k^2) \end{vmatrix}, \\ \vec{e}_2 &= \vec{e}_1^*, \quad \vec{e}_3 = \frac{\vec{k}}{\omega},\end{aligned}\quad (4)$$

Тут $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ – власні вектори квантово-механічного оператора спіральності для спіна $s = 1$. Довільний коефіцієнт методу Фур'є у (3) вибрано з умови нормування енергії електромагнітного поля, або повної енергії електромагнітно-скалярного поля:

$$P_0 = \frac{1}{2} \int d^3x (\vec{E}^2 + \vec{H}^2 + E_0^2 + H_0^2) = \int d^3k \omega (|c_k^1|^2 + |c_k^2|^2 + |c_k^3|^2 + |c_k^4|^2). \quad (6)$$

Бачимо, що $(\vec{E}(x), \vec{H}(x))$ – це дійсні вектори напруженостей електричного та магнітного полів записані у термінах комплексних квантово-механічних імпульсно-спіральних амплітуд $(c_k^1, c_k^2, c_k^3, c_k^4)$ відповідних електромагнітно-скалярних хвиль. Очевидно, що вектори напруженостей (3) електричного $\vec{E}$ і магнітного $\vec{H}$ полів містять поздовжні компоненти. Скалярні функції у (3) також визначають поздовжні хвилі, напрямком розповсюдження яких задає хвильовий вектор $\vec{e}_3 = \frac{\vec{k}}{\omega}$.

Оскільки густини струмів і зарядів у (2) задаються тими самими амплітудами, що і поздовжні електромагнітні та скалярні хвилі у (3), то робимо висновок, що такі поздовжні хвилі існують у околі струмів і зарядів (2), які їх породжують.

Поздовжні електричні хвилі у стандартних рівняннях Максвелла

Розглянемо стандартну систему рівнянь Максвелла

$$\begin{aligned}\partial_0 \vec{E} - \text{curl} \vec{H} &= -\text{grad} E^0, \\ \partial_0 \vec{H} + \text{curl} \vec{E} &= 0, \\ \text{div} \vec{E} &= -\partial_0 E^0, \quad \text{div} \vec{H} = 0,\end{aligned}\quad (7)$$

у якій густини струму і заряду мають вигляд

$$\vec{j}(x) = -\text{grad} E^0(x), \quad \rho(x) = -\partial_0 E^0(x). \quad (8)$$

Розв'язок системи рівнянь Максвелла (7) шукаємо методом Фур'є, тобто у вигляді інтегралу Фур'є. Кінцево цей розв'язок має вигляд:

$$\begin{aligned}\vec{E}(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k \sqrt{\frac{\omega}{2}} \{ [c_k^1 \vec{e}_1 + c_k^2 \vec{e}_2 + \alpha_k \vec{e}_3] e^{-ikx} + [c_k^{*1} \vec{e}_1^* + c_k^{*2} \vec{e}_2^* + \alpha_k^* \vec{e}_3^*] e^{ikx} \}, \\ \vec{H}(x) &= \frac{i}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k \sqrt{\frac{\omega}{2}} \{ [c_k^1 \vec{e}_1 - c_k^2 \vec{e}_2] e^{-ikx} - [c_k^{*1} \vec{e}_1^* - c_k^{*2} \vec{e}_2^*] e^{ikx} \}, \\ E^0(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k \sqrt{\frac{\omega}{2}} (\alpha_k e^{-ikx} + \alpha_k^* e^{ikx}).\end{aligned}\quad (9)$$

У (9) використано ті ж самі позначення (4), вибрано з умови нормування (6), або з умови нормування енергії електромагнітного поля: (5). Довільний коефіцієнт методу Фур'є у (9)

$$P_0 = \frac{1}{2} \int d^3x (\vec{E}^2 + \vec{H}^2) = \int d^3k \omega (|c_k^1|^2 + |c_k^2|^2).$$

Очевидно, що вектор напруженості електричного поля $\vec{E}(x)$ у (9) містить поздовжню компоненту, амплітуда якої α_k . Скалярна функція $E^0(x)$ у (9) має ту саму амплітуду α_k і також визначає поздовжню хвилю, напрямком розповсюдження якої задає хвильовий вектор $\vec{e}_3 = \frac{\vec{k}}{\omega}$.

Оскільки густини струму і заряду у (8) задаються тією самою амплітудою α_k , що і поздовжні електрична та скалярна хвилі у (9), то робимо висновок, що електрична компонента $\vec{E}(x)$ та скалярна хвиля $E^0(x)$ існують у околі струмів і зарядів (8), які їх породжують. Таким чином, якісну гіпотезу, що поздовжня електрична хвиля існує у околі зарядів і струмів, які її породжують, тут доведено строго математично.

Такий самий висновок стосується також і поздовжніх електромагнітних та скалярних хвиль у (3).

Перевірка справедливості отриманих розв'язків (3), (9) здійснюється їх безпосередньою підстановкою у рівняння (1), (7), відповідно.

Висновки

Важливо, що існування поздовжніх компонент векторів напруженостей електричного

$\vec{E}(x)$ і магнітного $\vec{H}(x)$ полів, а також відповідних скалярних хвиль $E^0(x)$, $H^0(x)$, напрямком розповсюдження яких задає хвильовий вектор $\vec{e}_3 = \frac{\vec{k}}{\omega}$, доведено не лише як наслідок узагальненої системи рівнянь Максвелла (1). Поздовжню компоненту вектора напруженості електричного поля $\vec{E}(x)$ (9) та відповідну скалярну хвилю $E^0(x)$ тут знайдено у якості розв'язків стандартної системи рівнянь Максвелла (7) з густинами струмів і зарядів градієнтного типу (8). Як видно з (8) і (9), густина такого заряду здійснює періодичну осциляцію у часі з частотою ω і може моделювати електрони, іони та інші заряджені частинки плазми (або кілька заряджених частинок), що знаходяться у зовнішньому електромагнітному полі цієї частоти. Особливо слід відмітити, що у експериментах [14–17] з лазерними пучками реєструється саме поздовжня електрична хвиля.

Твердження, що поздовжня електрична хвиля існує у околі зарядів і струмів, які її породжують, тут доведено строго математично. Представлений результат має безпосереднє відношення до фізичної інтерпретації експериментів [14–22] і використаних там фізичних моделей.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Cheney M. Tesla, master of lightning/ M. Cheney, R. Uth. – New York: Barnes and Noble Books, 1999. – 198 p.
- [2] Nedic S. Longitudinal waves in electromagnetism – toward a consistent theory / S. Nedic // Galilean Electrodynamics. – 2017. – V. 28, № 5. – P. 91–96.

- [3] Ferraro V.C.A. Longitudinal electromagnetic waves between parallel plates / V.C.A. Ferraro, Flint H.T. Ferraro // *Proceedings of the Physical Society*. – 1941. – V. 53, № 2. – P. 170–181.
- [4] Khvorostenko N.P. Longitudinal electromagnetic waves / N.P. Khvorostenko // *Russian Physical Journal*. – 1992. – V. 35, № 3. – P. 223–227.
- [5] Simulik V.M. Connection between the symmetry properties of the Dirac and Maxwell equations. Conservation laws / V.M. Simulik // *Theoretical and Mathematical Physics*. – 1991. – V. 87, № 1. – P. 386–393.
- [6] Krivsky I.Yu. General solution of the Maxwell equations with gradient-like sources and longitudinal electromagnetic waves / I.Yu. Krivsky, V.M. Simulik // *Non-Euclidean geometry in modern physics. BGL-1: The 1-st International Conference, 13–16 August 1997: Proceedings*. – Uzhgorod, 1997. – P. 193–199.
- [7] Кривський І.Ю. Про повздовжні електромагнітні хвилі / І.Ю. Кривський, В.М. Симулик // *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика*. – 1998. – № 2. – С. 121–125.
- [8] Simulik V.M. Longitudinal electromagnetic waves in the framework of standard classical electrodynamics [Електронний ресурс] / V.M. Simulik V.M. // *arXiv:1606.01738 [physics.class-ph]*. – 2016. – 3 pp. – Режим доступу: <https://arxiv.org/abs/1606.01738>.
- [9] Simulik V.M. Slightly generalized Maxwell classical electrodynamics can be applied to inneratomic phenomena / V.M. Simulik, I.Yu. Krivsky // *Annales de la Fondation Louis de Broglie*. – 2002. – V. 27, № 2. – P. 303–328.
- [10] Simulik V.M. Relationship between the Maxwell and Dirac equations: symmetries, quantization, models of atom / V.M. Simulik, I.Yu. Krivsky // *Reports on Mathematical Physics*. – 2002. – V. 50, № 3. – P. 315–328.
- [11] Simulik V.M. Classical electrodynamical aspect of the Dirac equation / V.M. Simulik, I.Yu. Krivsky // *Electromagnetic Phenomena*. – 2003. – V. 3, № 1(9). – P. 103–114.
- [12] Krivsky I.Yu. Fermi-Bose duality of the Dirac equation and extended real Clifford-Dirac algebra / I.Yu. Krivsky, V.M. Simulik // *Condensed Matter Physics*. – 2010. – V. 13, № 4. – P. 43101(1–15).
- [13] Simulik V.M. Bosonic symmetries, solutions and conservation laws for the Dirac equation with nonzero mass / V.M. Simulik, I.Yu. Krivsky, I.L. Lamer // *Ukrainian Journal of Physics*. – 2013. – V. 58, № 6. – P. 523–533.
- [14] Tidwell S.C. Generating radially polarized beams interferometrically / S.C. Tidwell, D.H. Ford, W.D. Kimura // *Applied Optics*. – 1990. – V. 29, № 15. – P. 2234–2239.
- [15] Dorn R. Sharper focus for a radially polarized light beam / R. Dorn, S. Quabis, G. Leuchs // *Physical Review Letters*. – 2003. – V. 91, № 23. – P. 233901(1–4).
- [16] Miyaji G. Intense longitudinal electric fields generated from transverse electromagnetic waves / G. Miyaji, N. Miyanaga, K. Tsubakimoto, K. Sueda, K. Ohbayashi // *Applied Physics Letters*. – 2004. – V. 84, № 19. – P. 3855–3857.
- [17] Niziev V.G. Generation of polarisation-nonuniform modes in a high-power CO₂-laser / V.G. Niziev, V.P. Yakunin, N.G. Turkin // *Quantum Electronics*. – 2009. – V. 39, № 6. – P. 505–514.

- [18] Kovrizhnykh L.M. Interaction of longitudinal and transverse waves in plasma / L.M. Kovrizhnykh, V.N. Tsytovich // Soviet Physics – JETP. – 1964. V. 19, № 6. – P. 1494–1499.
- [19] Bogdankevich L.S. Excitation of longitudinal electromagnetic waves in a restricted plasma by injection of relativistic electron beams / L.S. Bogdankevich, A.A. Rukhadze // Soviet Physics – JETP. – 1972. – V. 35, № 1. – P. 126–132.
- [20] Petrov E.Yu. Plasmons in QED vacuum / E.Yu. Petrov, A.V. Kudrin // Physical Review. – 2016. – V. A94, № 3. – P. 032107(1–8).
- [21] Datsyuk V.V. Properties of longitudinal electromagnetic oscillations in metals and their excitation at planar and spherical surfaces / V.V. Datsyuk, O.R. Pavlyniuk // Nanoscale Research Letters. – 2017. – V. 12, № 1. – P. 473(1–8).
- [22] Monstein C. Observation of scalar longitudinal electrodynamic waves / C. Monstein, J.P. Wesley // Europhysics Letters. – 2002. – V. 59, № 4. – P. 514–520.
- [23] Rebilas K. On the origin of longitudinal electrodynamic waves / K. Rebilas // Europhysics Letters. – 2008. – V. 83, № 6. – P. 60007(1–5).

Стаття надійшла до редакції 09.07.2019

В. М. Симулик¹, Т. М. Заяц²

¹Інститут електронної фізики НАН України, 88017, Ужгород, ул. Университетская, 21, Україна, e-mail: vsimulik@gmail.com

²Ужгородський національний університет, інженерно-технічний факультет, кафедра електронних систем, 88000, Ужгород, ул. Капітульная, 13, Україна, e-mail: taras.zajac@uzhnu.edu.ua

ОПИСАНИЕ ПРОДОЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН УРАВНЕНИЯМИ МАКСВЕЛЛА

Продольные электромагнитно-скалярные волны получены в качестве решения обобщенной системы уравнений Максвелла, которая является максимально симметричной формой этих уравнений. Особенно важным результатом является получение продольных электрической и скалярной волн в качестве непосредственного решения стандартной системы уравнений Максвелла с плотностями токов и зарядов градиентного типа. Представлено строгое математическое доказательство, что продольные электрическая и скалярная волны существуют в окрестности токов и зарядов, которые их порождают. Отмечена возможность применения полученных результатов к физической интерпретации современных экспериментов, в которых регистрируются продольные электромагнитные волны.

Ключевые слова: уравнения Максвелла, электромагнитное поле, классическая электродинамика, продольные электромагнитные волны.

V. M. Simulik¹, T. M. Zajac²

¹Institute of Electron Physics, NAS of Ukraine, 88017, Uzhhorod, 21 Universitetska Str., Ukraine, e-mail: vsimulik@gmail.com

²Uzhhorod National University, Engineering-Technical Faculty, Department of Electronic Systems, 88000, Uzhhorod, 13 Kapitulna Str., Ukraine, e-mail: taras.zajac@uzhnu.edu.ua

DESCRIPTION OF THE LONGITUDINAL ELECTROMAGNETIC WAVES BY THE MAXWELL EQUATIONS

Purpose. The long time discussion on existence, or not existence, of longitudinal electromagnetic waves both in nature and in Maxwell classical electrodynamics is under consideration. The modern experiments on the existence of such waves are reviewed briefly. The link between the longitudinal electromagnetic waves and the system of Maxwell equations is demonstrated.

Methods. Maxwell classical electrodynamics, Fourier method, Fourier transform, amplitude analysis.

Results. The longitudinal wave component of the electric field strength vector is found as an exact solution of the standard Maxwell equations with specific currents and charges of the gradient type. The corresponded scalar wave component, which is propagated in the same direction, is found as well. The longitudinal components of both electric and magnetic field strengths, together with two corresponded scalar waves, are found as the exact solution of generalized Maxwell equations, which are characterized by the maximally high symmetry properties.

Conclusions. The analysis of found solutions demonstrates that longitudinal components are located near the corresponded current and charge densities, which are the sources of such fields. It follows from the fact that current and charge densities and the corresponded longitudinal components in the solutions are determined by the same amplitudes. The best examples of corresponding physical reality are such big charges as the whole water area of closed sea, the planet Earth in general, their oscillations and corresponding longitudinal electric and scalar waves.

Keywords: the Maxwell equations, electromagnetic field, classical electrodynamics, longitudinal electromagnetic waves.

REFERENCES

- [1] Cheney, M., Uth, R. (1999), Tesla, master of lightning. Barnes and Noble Books, New York, 198 p.
- [2] Nedic, S. (2017), «Longitudinal waves in electromagnetism – toward a consistent theory», Galilean Electrodynamics, V. 28, No. 5, pp. 91–96.
- [3] Ferraro, V.C.A., Flint, H.T. (1941), «Longitudinal electromagnetic waves between parallel plates», Proceedings of the Physical Society, V. 53, No. 2, pp. 170–181.
- [4] Khvorostenko, N.P. (1992), «Longitudinal electromagnetic waves», Russian Physical Journal, V. 35, No. 3, pp. 223–227.
- [5] Simulik, V.M. (1991), «Connection between the symmetry properties of the Dirac and Maxwell equations. Conservation laws», Theoretical and Mathematical Physics, V. 87, No. 1, pp. 386–393.
- [6] Krivsky, I.Yu., Simulik, V.M. (1997), «General solution of the Maxwell equations with gradient-like sources and longitudinal electromagnetic waves», Proceedings of the 1-st In-

- ternational Conference «Non-Euclidean geometry in modern physics. BGL-1. Uzhgorod, Ukraine, 13–16 August 1997», pp. 193–199.
- [7] Krivsky, I.Yu., Simulik, V.M. (1998), «On the longitudinal electromagnetic waves» [«Pro povzdovzhni elektromahnitni hvyli»], Uzhgorod University Scientific Herald. Serie Physics, No. 2, pp. 121–125.
 - [8] Simulik, V.M. (2016), «Longitudinal electromagnetic waves in the framework of standard classical electrodynamics», arXiv:1606.01738 [physics.class-ph], available at: <https://arxiv.org/abs/1606.01738>
 - [9] Simulik, V.M., Krivsky, I.Yu. (2002), «Slightly generalized Maxwell classical electrodynamics can be applied to inneratomic phenomena», Annales de la Fondation Louis de Broglie, V. 27, No. 2, pp. 303–328.
 - [10] Simulik, V.M., Krivsky, I.Yu. (2002), «Relationship between the Maxwell and Dirac equations: symmetries, quantization, models of atom», Reports on Mathematical Physics, V. 50, No. 3, pp. 315–328.
 - [11] Simulik, V.M., Krivsky, I.Yu. (2003), «Classical electrodynamic aspect of the Dirac equation», Electromagnetic Phenomena, V. 3, No. 1(9), pp. 103–114.
 - [12] Krivsky, I.Yu., Simulik, V.M. (2010), «Fermi-Bose duality of the Dirac equation and extended real Clifford-Dirac algebra», Condensed Matter Physics, V. 13, No. 4, pp. 43101(1–15).
 - [13] Simulik, V.M., Krivsky, I.Yu., Lamer, I.L. (2013), «Bosonic symmetries, solutions and conservation laws for the Dirac equation with nonzero mass», Ukrainian Journal of Physics, V. 58, No. 6, pp. 523–533.
 - [14] Tidwell, S.C., Ford, D.H., Kimura, W.D. (1990), «Generating radially polarized beams interferometrically», Applied Optics, V. 29, No. 15, pp. 2234–2239.
 - [15] Dorn, R., Quabis, S., Leuchs, G. (2003), «Sharper focus for a radially polarized light beam», Physical Review Letters, V. 91, No. 23, pp. 233901(1–4).
 - [16] Miyaji, G., Miyanaga, N., Tsubakimoto, K., Sueda, K., Ohbayashi, K. (2004), «Intense longitudinal electric fields generated from transverse electromagnetic waves», Applied Physics Letters, V. 84, No. 19, pp. 3855–3857.
 - [17] Niziev, V.G., Yakunin, V.P., Turkin, N.G. (2009), «Generation of polarisation-nonuniform modes in a high-power CO₂-laser», Quantum Electronics, V. 39, No. 6, pp. 505–514.
 - [18] Kovrizhnykh, L.M., Tsytovich, V.N. (1964), «Interaction of longitudinal and transverse waves in plasma», Soviet Physics – JETP, V.19, No. 6, pp. 1494–1499.
 - [19] Bogdankevich, L.S., Rukhadze, A.A. (1972), «Excitation of longitudinal electromagnetic waves in a restricted plasma by injection of relativistic electron beams», Soviet Physics – JETP, V. 35, No. 1, pp. 126–132.
 - [20] Petrov, E.Yu., Kudrin, A.V. (2016), «Plasmons in QED vacuum», Physical Review, V. A94, No. 3, pp. 032107(1–8).
 - [21] Datsyuk, V.V., Pavlyniuk, O.R. (2017), «Properties of longitudinal electromagnetic oscillations in metals and their excitation at planar and spherical surfaces», Nanoscale Research Letters, V. 12, No. 1, pp. 473(1–8).

- [22] Monstein, C., Wesley, J.P. (2002), «Observation of scalar longitudinal electrodynamic waves», *Europhysics Letters*, V. 59, No. 4, pp. 514–520.
- [23] Rebilas, K. (2008), «On the origin of longitudinal electrodynamic waves», *Europhysics Letters*, V. 83, No. 6, pp. 60007(1–5).

©Ужгородський національний університет

УДК 539.125
PACS 11.55.Jy, 13.85.Dz, 12.40.Nn
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.125-133

N. Bence¹, A.I. Lengyel², Z.Z. Tarics²

¹Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, 14, Universitetska Str., Ukraine

²Institute of Electron Physics, NAS of Ukraine, 88000, Uzhhorod, 21, Universitetska Str., Ukraine,
 e-mail: bencenorbert007@gmail.com

POMERON MODELS AT LHC ENERGIES

Purpose. The existing experimental data on the elastic scattering of protons (antiprotons) by protons, including those obtained at the Collider, are not in doubt for non-exponential behavior of differential cross-section. Our task is to choose the most adequate analytical model that describes this behavior of the differential cross sections for elastic pp - and $\bar{p}p$ scattering.

Methods. Pomeron alternatives for describing the non-exponential behavior of the diffraction cone in differential pp - and $\bar{p}p$ elastic cross-section are investigated.

Results. It was shown that the pomeron amplitude with two terms with different t -dependences is strongly suggested by the data.

Conclusions. The values of the slope $B(s, t)$ and curvature parameter $C(s, t)$ have been calculated for different Pomeron model within the wide s – and low t – range with the allowance made for the diffraction cone shape. The absolute values of the curvature parameter $C(s, 0)$ is predicted to be decreasing depending on s and change of sign at asymptotically large energies.

Keywords: elastic scattering, high energy, pomeron, slope, curvature.

Introduction

Elastic scattering at high energy and low momentum transfer is crucial to the choice of appropriate pomeron model to description the data of experiment. In this connection the knowledge of such fundamental physical values of the elastic scattering as the total $\sigma_{tot}(s, t)$, differential cross sections $d\sigma(s, t)/dt$, slope $B(s, t)$ and curvature parameter $C(s, t)$ (for brevity, simply as curvature) is decisive in checking up the certain strong interaction model.

Recently the revealing the novel and unexpected non-exponential behavior of the elastic proton-proton differential cross-section at LHC energies [1, 2] have initiated the revision of the methods of investigation [3–5]. The total cross sections measured at LHC energies [2, 6] indicates that the «asymptopia» (i.e. the Froissart boundary) is attained.

Taking into account that at high energies the values of $\sigma_{tot}(s, t)$, $B(s, t)$ and $C(s, t)$ were determined in the same LHC experiments and

keeping in mind mentioned above, the development of the up to date criteria of the unified approach for their determination seems to be natural.

It has been shown in [7, 8] that, starting with the available experimental data, we are up against a considerable precise data for the determination of the above mentioned parameters.

A modified method of determination of the slope, curvature and phase on the basis of the experimental data has been suggested in [9]. A critical analysis of the data $\sqrt{s} = 19.4, 546$ and 1800 GeV has been performed allowing one to find both the slope and the curvature usually defined as

$$B(s, t) = \frac{d}{dt} \ln \left(\frac{d\sigma(s, t)}{dt} \right), \quad (1)$$

$$C(s, t) = \frac{1}{2} \frac{dB(s, t)}{dt}. \quad (2)$$

It should be noted that despite the small effect the curvature affects the small- t diffraction scattering values, thus it should be taken

into account in the elastic scattering analysis [10]. Similarly, we have also used the procedure of overlapping t -bins [7,10] to reconstructing the local nuclear slopes from the experimental angular distributions as well as the curvature $C(s, t)$ at $t = 0$ when the $\sqrt{s}$ reaches the Tevatron energies. It was applied the physical threshold properties of the scattering amplitude expressed in the nonlinear Pomeron trajectory [11]:

$$\alpha(t) = 1 + \alpha' t + \gamma(\sqrt{t_0} - \sqrt{t_0 - t}), \quad (3)$$

where $t_0 = 4m_\pi^2$ the lowest threshold, m_π - pion mass. Concerning the search for asymptopia Block and Chan [12] considered the curvature $C(s, 0)$ as a sensitive indicator of the transition to asymptopia going from positive values at the ISR energies, to be zero at the Tevatron energy. They have expected for any model, which approaches the sharp black disc limit that the curvature at $t = 0$ should become negative at high energies. In this relation the idea arises to revise available elastic pp - and $\bar{p}p$ -scattering data for high energies within a wide interval of s and low $|t|$ starting from the method suggested in [9]. Due to the unified approach in calculating the characteristics B and C we shall predict their energy behavior. The similar procedure has been executed earlier for the energies ranging up to the Tevatron energies (~ 2 TeV) in the approximation of the unified origin of the leading singularity for the pp - and $\bar{p}p$ -scattering [7]. It has been shown that the curvature for the pp - and $\bar{p}p$ -scattering shows different behavior over the energy region under study. Later the change of sign for curvature $C(s, t = 0)$ when $\sqrt{s}$ exceeds the Tevatron energy was predicted in model with two-components Pomeron and Odderon model [10]. It makes sense to recall the remarks on the asymptopia which was correctly noted in [13] long time ago: «for the moment, the situation is such that we do not find any evidence for new and not old-fashioned physics in hadronic diffraction at high energies. Odderon and threshold effects may be there, but do not seem to be relevant for the description of the bulk of the interactions: total cross-section, ratio ρ , differential cross section, etc.» The time has come when you can reconsider these predictions. Now the ideal place to search for

the asymptopia is the LHC. In [14] among others the investigation of the forward slope $B(s)$ and interaction radius connected with impact parameter b for nucleus has been done. The authors have come to the conclusion that we «are still extremely far from the asymptopia, the region where some known asymptotic relations should hold». There we shall study the s - and t -behavior of B and C within the framework of the phenomenological model which considers naturally the curvature as the manifestation of a complex structure of the Pomeron in the first cone region and at all available energies up to $\sqrt{s} = 13$ TeV and, thus, recalculate the $B(s, t)$ and $C(s, 0)$ values. Our strategy for the investigation of the shape of a non exponential behavior of the diffraction cone and its consequences will be the following:

1) First we have collect the data set of differential cross section for pp - and $\bar{p}p$ -scattering where the non-exponential behavior of diffraction cone is clearly present in broad area of energy and appropriate interval of momentum transfer to select the most suitable form of this non-exponentiality.

2) Next we chose the best form of Pomeron for description of selected data set, combining the nonlinear Pomeron trajectory and non-exponential residue contribution.

Data selection

To look for non-exponential behavior similar to that observed in the CERN [1, 2] we have separate those experimental data for pp - and $\bar{p}p$ -scattering which contains the number of experimental points $n \cong 100$, namely: $E_{cm} = 19.4$ [15]; 23.5; 30.7; 44.7; 52.8; 62.5 GeV [16]; 8 [1] and 13 TeV [2] for pp -scattering and $E_{cm} = 546$ GeV [17] for $\bar{p}p$ -scattering. To determine the interval of momentum transfer for the experimental data, where it is necessary to carry out the investigations, we shall use the overlapping bin procedure (OBP) [7,10] whose idea is as follows. The whole interval over the momentum transfer $|t|$ is divided into bins with a reasonable number of experimental data point (≈ 10) so that within the range of the bin the given experimental points can be approximated by the

$$\left(\frac{d\sigma(t)}{dt}\right)_i = |a_i e^{b_i t}|^2, \quad (4)$$

a_i and b_i are free parameters. Wherein the bins are shifted with respect to each other by one or more measuring channel in such a manner that they overlap so that for each investigated energy we have obtained the set of «experimental» value of local slopes b_i (see Fig. 1) close to the original number of true experimental points of $d\sigma/dt$. The error bars Δb_i shown in the figure represent the fitting uncertainty. In the area of interest we observe the following features of the structure of the slope (Fig. 2):

- sharp growth of the local slopes, when approaching the region of interference the Coulomb and nuclear amplitudes ($|t| < 0.01 \text{ GeV}^2$);
- slowly decreasing sequence of local values distributed along a smooth curve with oscillation around it;
- collapse of the slope at $|t| < 1 \text{ GeV}^2$ corresponding to the dip in the $|t|$.

Having carried out such a procedure for all separate energy of selected data sets of the differential cross sections pp - and $p\bar{p}$ scattering, we have to implement two cutoffs: first, one needs to be away from the Coulomb interference region and second to be far from region, where rescatterings are important, $t_c < |t| < t_d (\text{GeV}^2)$ where t_c and t_d are the correspond limit values (see Tab. 1). The remaining data is the comprising rather large number of experimental points in order to determine the t -dependence of the slope and curvature. It is convenient to take it with the help of the «experimental» points of the slopes obtained by OPB as the deepest point of the local bins set. This criterion of the diffraction cone end corresponds to the common concept of the «first diffraction cone».

Choice of curvature shape

There we shall study the s - and t -behavior of slope B and curvature C within the framework

of the phenomenological model which considers naturally the curvature as the revelation of the threshold behavior of the scattering amplitude in the t -channel and the shape of proton in the first cone region, thus, recalculate the $B(s, 0)$ and $C(s, 0)$ values. Here we shall divert the reader's attention from our attempt to account for the oscillations observed in the slope and confine ourselves to the consideration only the smooth component of the diffraction cone fine structure, i.e., the curvature. To do this, we will choose two possible non exponential behavior of the differential cross section within the diffraction cone at fixed energy [7]:

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = a e^{\delta t + \gamma \sqrt{t_0 - t}}, \quad (5)$$

or [1]

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = a e^{bt + ct^2}. \quad (6)$$

To visualize the quality of the fit of $d\sigma(t)/dt$ and the choice of a better approximation of non-linearity, we shall use two methods: the OBP and the normalized differential cross sections $R(t)$. In the first case each bin contains 8 experimental points. The overlap of bins is maximal, i.e. each bin shifts to one experimental point relative to the neighboring one (see Fig. 1). For the second the normalized experimental data:

$$R_{exp}(t) = \frac{(d\sigma/dt)_{exp} - (d\sigma/dt)_{lin}}{(d\sigma/dt)_{lin}}, \quad (7)$$

where $(d\sigma/dt)_{exp}$ – experimental points, $(d\sigma/dt)_{lin}$ – the approximation of all experimental points at given fixed energy from the selected interval of momentum transfer by a linear exponential (4). Accordingly, the theoretical values $R_{th}(t)$ are calculated for (5) and (6) with the parameters of the best fit to the experimental data for each individual of 9 sets.

$$R_{th}(t) = \frac{(d\sigma/dt)_{th} - (d\sigma/dt)_{lin}}{(d\sigma/dt)_{lin}}, \quad (8)$$

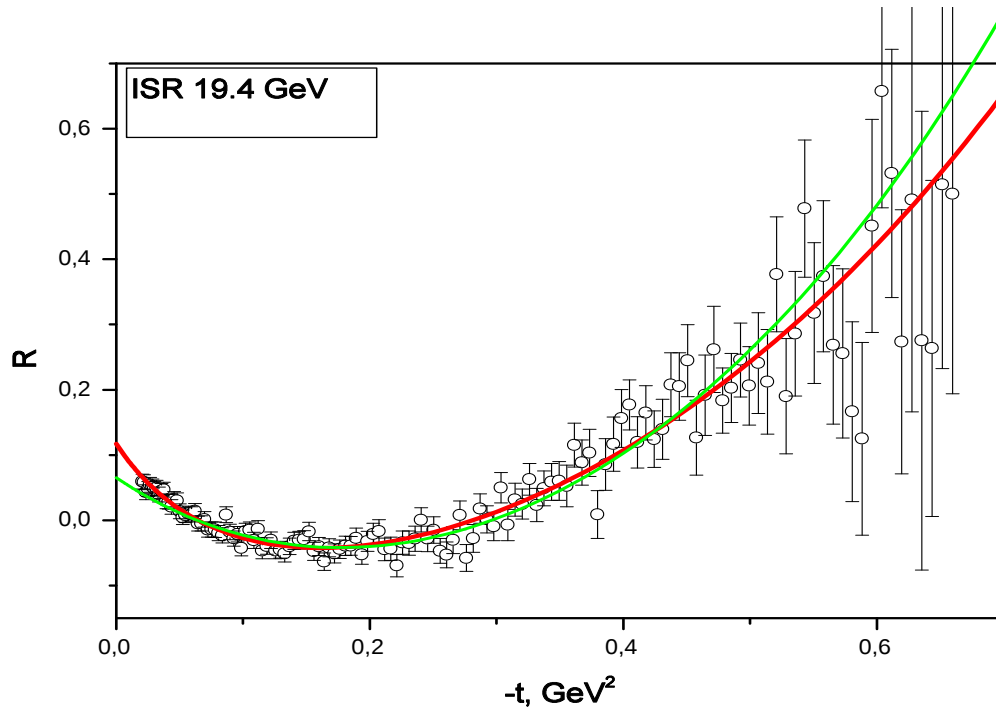


Figure 1: The experimental function $R_{exp}(t)$, calculated by (7) for energy $\sqrt{s} = 19.4$ GeV. Solid red line - calculated function $R_{th}(t)$ by the formula (8) for fitted parameters by (5). Solid green line - calculated function $R_{th}(t)$ by (8) for fitted parameters by (6), bar - fitting uncertainty.

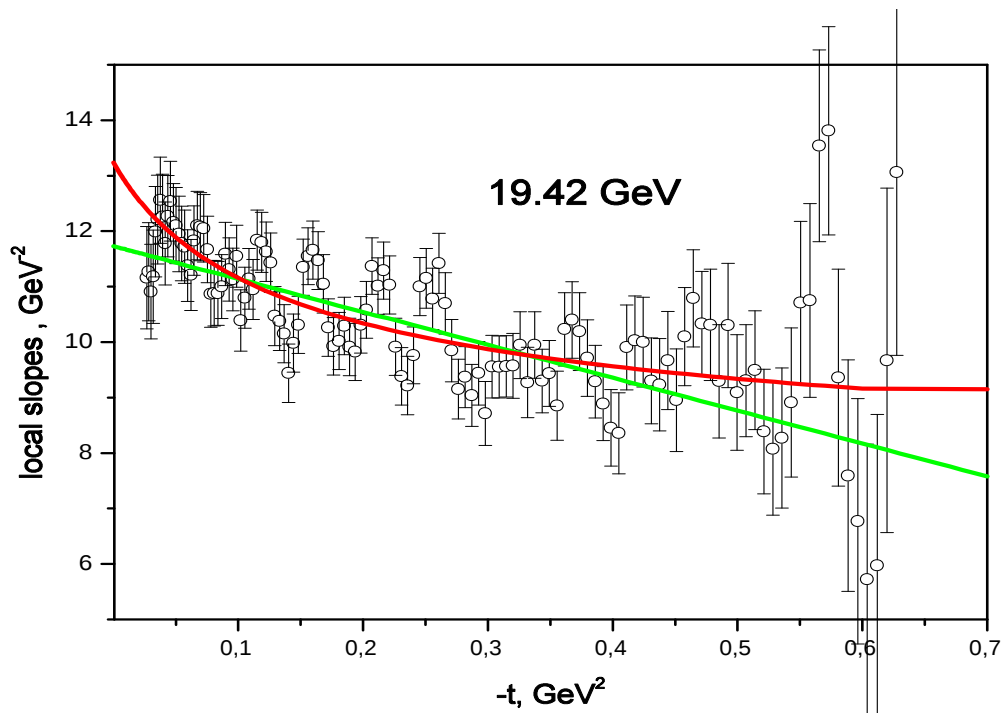


Figure 2: The local slopes b_i , calculated with help the procedure OBP by (4), bar - fitting uncertainty. Solid red line - calculated by the formula (9) for fitted parameters by (6). Solid green line - calculated by the formula (9) for fitted parameters by (6), bar - fitting uncertainty.

Table 1: Compilation of data. t_c – lover and t_d – upper limit values of the t -range; n – number of experimental points; a and b – linear fit parameters. Set No 1-6 and 8-9 – pp -scattering, set No 7 – $p\bar{p}$ - scattering.

Set	E_{cm}, GeV	$ t_c , GeV^2$	$ t_d , GeV^2$	n	$a, mb/GeV^2$	b, GeV^{-2}
1	19,42	0.0206	0.6599	134	72.60	10.60
2	23.5	0.042	0.53	65	66.54	10.31
3	30.7	0.038	0.70	102	72.06	10.32
4	44.7	0.05375	0.28875	99	79.22	11.49
5	52.8	0.0308	0.396	111	85.67	11.72
6	62.5	0.0215	0.49	53	92.7	12.49
7	546	0.0325	0.3175	58	196.2	14.76
8	8000	0.0285	0.19478	30	527	19.39
9	13000	0.0207	0.166	86	633.4	20.43

From the comparison of the results of the fit for the two models (5) and (6), we see that it is difficult to give preference to one or another approximation by the function $R(t)$. Instead, such a comparison of the results of the calculation of the slopes should definitely favor the approximation (5) as it clearly seen from Fig. 2. The same pattern is observed for all other cases from the selected ones. The general behavior of the curvature with increasing energy in both cases is the same. As it was mentioned in [9] the curvature is significantly stronger than that found using the simple quadratic-exponential ($c=const$) fits which have been traditional for analyzing experiments [1, 2]. Therefore alternatively, as a non-linear rexponential factor, we will use the approximation (5).

Choice of the Pomeron

The next step is to choose the Pomeron contribution to the scattering amplitude, which corresponds to the observed behavior (decreasing) of the curvature $C(s, 0)$. Taking into account the analysis performed above, we will choose a common form of the Pomeron contribution to the cross-symmetric scattering amplitude as

$$A_i(s, t) = g_i \tilde{s}^{\alpha_p(t)} e^{\varphi(t)}, \quad (9)$$

where

$$\tilde{s} = -i \frac{s}{s_0}, s_0 = 1 \text{ GeV}^2, \quad (10)$$

$\alpha_p(t)$ – non-linear Pomeron trajectory (3). Non-linear exponential residue function is [8, 10].

$$\varphi(t) = bt + \beta \sqrt{4m_\pi^2 - t} - 2m_\pi. \quad (11)$$

The differential cross section for each i-set has the form

$$\left(\frac{d\sigma(t)}{dt} \right)_i = \frac{\pi}{s^2} |A_i(s, t)|^2. \quad (12)$$

i – number of set (1...9) at fixed energy ($\sqrt{s} = 19,4; 23,5; 30,7; 44,7; 52,7; 62,5; 546; 8000; 13000$ GeV). Next, we will perform an overall (Pomeron) fit of all the above selected 9 sets of data by (9)-(14) with (3) where g_i - the normalization factor for each set separately. Consider three variants of the combination of the contribution of the non-linear exponential behavior of $\varphi(t)$ and the nonlinear trajectory of the Pomeron $\alpha_P(t)$ [7, 8]:

$$\beta \neq 0, \gamma \neq 0, \dots (I)$$

$$\beta \neq 0, \gamma = 0, \dots (II)$$

$$\beta = 0, \gamma \neq 0, \dots (III)$$

The curvature $C(s, t)$ for variants I-III respectively have the form

$$C(s, t) = -\frac{1}{2} \frac{\gamma \ln \frac{s}{s_0} + \beta}{(t_0 - t)^{3/2}}, \quad (13)$$

$$C(s, t) = -\frac{1}{2} \frac{\beta}{(t_0 - t)^{3/2}}, \quad (14)$$

$$C(s, t) = -\frac{1}{2} \frac{\gamma \ln \frac{s}{s_0}}{(t_0 - t)^{3/2}}, \quad (15)$$

Table 2: The parameters of the Pomeron fit for I-III variants

	I		II		III	
Parameter	Value	Error	Value	Error	Value	Error
g_1	64.48	0.18	63.52	0.16	58.87	0.11
g_2	64.40	0.34	62.53	0.33	58.14	0.29
g_3	72.41	0.22	71.67	0.21	68.18	0.19
g_4	73.50	0.23	73.01	0.22	68.15	0.17
g_5	78.27	0.18	77.50	0.17	73.27	0.13
g_6	81.38	0.17	80.76	0.16	77.01	0.13
g_7	180.5	0.8	180.7	0.8	177.7	0.7
g_8	450.7	0.7	457.1	0.5	463.2	0.6
g_9	526.0	0.8	534.8	0.5	544.5	0.7
b_p	0.8383	0.0494	1.414	0.018	3.019	0.005
α'	0.4144	0.045	0.3518	0.007	0.2308	0.0029
γ	0.05411	0.00511	—	—	—0.1153	0.0002
β	-2.149	0.048	1.619	0.023	—	—
χ^2/dof	2.98		3.20		5.77	

As can be seen from Table 2. fit by the variant I with non-linear trajectory and a non-linear exponential residue function is well consistent with experiment data. This makes us choose the variant I for the Pomeron contribution to the scattering amplitude. In this case the relative nonlinear trajectory plays the minor role, and option III is by no means acceptable [3]. The behavior of $C(s, 0)$ in this case, calculated by (13), has a decreasing character.

Conclusions

We have studied the phenomenology of the pp - and $\bar{p}p$ - elastic scattering within a wide energy range from tens of GeV to tens of TeV by using a model in which the analytical properties of the scattering amplitude are accounted for by the threshold singularity in the cross-channel. It has been shown that such features reflect adequately the smooth part of the t -dependence of the slope in a form of a concave curve found with the help of the model-independent procedure of overlapping t -bins. The calculated

values of the curvature differs from zero due to that we have chosen the physical threshold in the cross channel as $t_0 = 4m_\pi^2$ and non-exponential residue of pomeron pole. To clarify the question whether the non-linear exponential behavior of the diffraction cone is due to a nonlinear trajectory or non-linear exponential residue function it is necessary additionally take into account the novel LHC data. We emphasize that the non-exponential function $\varphi(t)$ entering to in the Pomeron pole residue, as well as the non-linearity of its trajectory $\alpha_p(t)$ is strongly suggested by the data. As a result, one can observe that the curvature $C(s, 0)$ has a tendency to decrease and change the sign. It has been shown that $C(s, 0)$ calculated with the inclusion of the non-linear exponential residue function together with the non-linear Pomeron trajectory decreases going into the «asymptopia» mode. As for the energy dependence of the curvature, $C(s, 0)$ calculated with the inclusion of above mentioned residue function together with the non-linear Pomeron trajectory decreases, as expected, crossing the energy axis at $\sqrt{s} > 10^4$ TeV.

REFERENCES

- [1] Antchev, G., Aspell, I. *et al.* (TOTEM Collaboration) (2015), «Evidence of non-exponential elastic proton-proton differential cross-section at low $|t|$ and $\sqrt{s} = 8$ TeV by TOTEM», Nucl. Phys. B, V. 899, pp. 527–546.

- [2] Antchev, G., Aspell, I. *et al.* (TOTEM Collaboration)(2017), «First determination of the ρ parameter at $\sqrt{s} = 13$ TeV – probing the existence of a colorless three-gluon bound state», *Eur. Phys. J. C*, V. 79, pp. 785 (1–26).
- [3] Jenkovszky, L., Lengyel, A. (2015), «Low- $|t|$ structures in elastic scattering at the LHC», *Acta Phys. Pol. B*, V. 46, pp. 863–877.
- [4] Khose, V.A., Martin, A.D. and Ryskin, M.G. (2018), «Elastic proton-proton scattering at 13 TeV», *Phys. Rev. D*, V. 97, pp. 034019(1–6).
- [5] Martynov, E. and Nicolescu, B. (2018), «Did TOTEM experiment discover the Odderon?», *Phys. Lett. B*, V. 778, pp. 414–418.
- [6] Antchev, G., Aspell, I. *et al.* (TOTEM Collaboration) (2016), «Measurement of Elastic pp Scattering at $\sqrt{s} = 8$ TeV in the Coulomb-Nuclear Interference Region - Determination of the ρ Parameter and the Total Cross-Section», *Eur. Phys. J. C*, V. 76, pp. 661 (1–21).
- [7] Desgrolard, P., Lengyel, A.I. and Martinov, E.S. (1997), «Nonlinearities and Pomeron non-factorizability in convention diffraction», *Nuovo Cimento*, V. 110, pp. 251–266.
- [8] Bence, N., Lengyel, A.I., Tarics, Z.Z. (2019), «Comparative analysis of analytical models for high energy pp-scattering», IEP-2019. International Conference of young scientists and post-graduates. Uzhhorod, 21–24 May 2019. Proceedings of the conference. Uzhhorod, 2019, pp. 101–102.
- [9] Pumplin, J. (1992), «Analysis of elastic scattering at low momentum transfer», *Phys. Lett. B*, V. 276, pp. 517–525.
- [10] Desgrolard, P., Kontros, J., Lengyel, A.I., Martinov, E.S. (1997), «Local nuclear slope and curvature in high energy pp and $\bar{p}p$ elastic scattering», *Nuovo Cim.*, V. 110A, pp. 615–630.
- [11] Cohen-Tannoudji, G., Iljin, V. V., Jenkovszky, L. L., Tutik, R. S. (1972), «A model for the pomeron trajectory», *Lett. Nuovo Cim.*, V. 5, pp. 957–962.
- [12] Block, M., Cahn, B.N. (1985), «High-energy pp and forward elastic scattering and total cross sections», *Rev. Mod. Phys.* V.57, pp. 563–598.
- [13] Dias de Deus, Jorge and Padua, Antonio Braz de(1993), «The search of asymptopia in soft physics at high energy», *Phys. Lett. B*, V. 317, pp. 428–432.
- [14] Petrov, V.A., Okorokov, V.A. (2018), «The Size Seems to Matter or Where Lies the «Asymp-topia»?», *Int. J. Mod. Phys.*, V. A33, pp. 1850077.
- [15] Schiz, A., Fajardo, L.A. *et al.* (1981), «High-statistics study of π^+p , π^-p , and pp elastic scattering at 200 GeV/c», *Phys. Rev. D*, V. 24, pp. 26.
- [16] Amaldi, U., Schubert, K.R. (1980), «Impact parameter interpretation of proton-proton scattering from a critical review of all ISR data», *Nucl. Phys. B*, V. 166, pp. 301–320.
- [17] Bozzo, M., Braccini, P.L. *et al.* (UA4 Collaboration) (1985), «Elastic scattering at the CERN SPS Collider up to a four-momentum transfer of 1.55 GeV²», *Phys. Lett. B*, V. 155, pp. 197 – 202.

Стаття надійшла до редакції 30.06.2019

Н. Бенце¹, А.В. Лендел², З.З. Торич²

¹Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, ул. Университетская, 14, Украина

²Институт электронной физики НАН Украины, 88017, г. Ужгород, ул. Университетская, 21, Украина

e-mail: bencenorbert007@gmail.com

МОДЕЛИ ПОМЕРОНА ПРИ ЭНЕРГИЯХ БАК

Значения наклона $B(s,t)$ и параметра кривизны $C(s,t)$ рассчитаны в широком интервале энергий s и при малых t с учетом формы дифракционного конуса. Предсказано убывание абсолютного значения параметра кривизны $C(s,0)$ в зависимости от s с сменой знака при асимптотически высоких энергиях.

Ключевые слова: упругое рассеяние, высокие энергии, померон, наклон, кривизна.

Н. Бенце¹, О.І. Лендел², З.З. Торич²

¹Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Університетська, 14, Україна

²Інститут електронної фізики, НАН України, 88000, Ужгород, вул. Університетська, 21, Україна

e-mail: bencenorbert007@gmail.com

МОДЕЛІ ПОМЕРОНА ПРИ ЕНЕРГІЯХ ВАК

Значення нахилу $B(s,t)$ та параметра кривини $C(s,t)$ розраховані в широкому інтервалі енергій s та при малих t з урахуванням форми дифракційного конусу. Передбачається, що абсолютні значення параметра кривини $C(s,0)$ зменшуються залежно від s із зміною знаку при асимптотично високих енергіях.

Ключові слова: пружне розсіювання, високі енергії, померон, нахил, кривина.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Antchev G. Evidence of non-exponential elastic proton-proton differential cross-section at low $|t|$ and $\sqrt{s} = 8$ TeV by TOTEM / G. Antchev, I. Aspell *et al.* (TOTEM Collaboration) // Nucl. Phys. B. – 2015. – V. 899. – P. 527–546.
- [2] Antchev G. First determination of the ρ parameter at $\sqrt{s} = 13$ TeV – probing the existence of a colorless three-gluon bound state / G. Antchev, I. Aspell *et al.* (TOTEM Collaboration) // Eur. Phys. J. C. – 2017. – V. 79. – P. 785 (1–26).
- [3] Jenkovszky L. Low- $|t|$ structures in elastic scattering at the LHC / L. Jenkovszky, A. Lengyel // Acta Phys. Pol. B. – 2015. – V. 46. – P. 863–877.
- [4] Khose V.A. Elastic proton-proton scattering at 13 TeV / V.A.Khose, A.D. Martin, M.G. Ryskin // Phys. Rev. D. – 2018. – V. 97. – P. 034019.
- [5] Martynov E. Did TOTEM experiment discover the Odderon? / E. Martynov, B. Nicolescu // Phys. Lett. B. – 2018. – V. 778. – P. 414–418.
- [6] Antchev G. Measurement of Elastic pp Scattering at $\sqrt{s} = 8$ TeV in the Coulomb-Nuclear Interference Region - Determination of the ρ Parameter and the Total Cross-Section

- / G. Antchev, I. Aspell *et al.* (TOTEM Collaboration) // Eur. Phys. J. C. — 2016. — V. 76. — P. 661 (1–21).
- [7] Desgrolard P. Nonlinearities and Pomeron nonfactorizability in convention diffraction / P. Desgrolard, A.I. Lengyel and E.S. Martinov // Nuovo Cimento. — 1997. — V. 110. — P. 251–266.
- [8] Bence N. Comparative analysis of analytical models for high energy pp-scattering / N. Bence, A.I. Lengyel, Z.Z Tarics // IEP-2019. International Conference of young scientists and post-graduates. Uzhhorod, 21–24 May 2019. Proceedings of the conference. Uzhhorod, P. 101–102.
- [9] Pumplin J. Analysis of elastic scattering at low momentum transfer / J. Pumplin // Phys. Lett. B. — 1992. — V. 276 — P. 517–525.
- [10] Desgrolard P. Local nuclear slope and curvature in high energy pp and $\bar{p}p$ elastic scattering / P. Desgrolard, J. Kontros, A.I. Lengyel, E.S. Martinov // Nuovo Cim. — 1997. — V. 110A. — P. 615–630.
- [11] Cohen-Tannoudji G. A model for the pomeron trajectory / G. Cohen-Tannoudji, V.V. Iljin, L.L. Jenkovszky, R.S. Tutik // Lett. Nuovo Cim. — 1972. — V. 5. — P. 957–962.
- [12] Block M. High-energy pp and forward elastic scattering and total cross sections / M. Block, B.N. Cahn // Rev. Mod. Phys. — 1985. — V. 57. — P. 563–598.
- [13] Dias de Deus Jorge The search of asymptopia in soft physics at high energy / Jorge Dias de Deus, Antonio Braz de Padua // Phys. Lett. B. — 1993. — V. 317. — P. 428–432.
- [14] Petrov V.A. The Size Seems to Matter or Where Lies the «Asymptopia»? / V.A. Petrov, V.A. Okorokov // Int. J. Mod. Phys. — 2018. — V. A33. — P. 1850077.
- [15] Schiz A. High-statistics study of π^+p , π^-p , and pp elastic scattering at 200 GeV/c / A. Schiz, L.A. Fajardo *et al.* // Phys. Rev. D. — 1981. — V. 24. — P. 26.
- [16] Amaldi U. Impact parameter interpretation of proton-proton scattering from a critical review of all ISR data / U. Amaldi, K.R. Schubert // Nucl. Phys. B. — 1980. — V. 166. — P. 301–320.
- [17] Bozzo M. Elastic scattering at the CERN SPS Collider up to a four-momentum transfer of 1.55 GeV² / M. Bozzo, P.L. Braccini, *et al.* (UA4 Collaboration) // Phys.Lett. B. — 1985. — V. 155. — P. 197–202.

УДК 520.82, 520.88
PACS 95.85.Kr, 96.25.De, 96.25.Vt
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.134-140

В.І. Кудак¹, Л.С. Шакун², В.М. Періг¹, В.Є. Саваневич³

¹Лабораторія космічних досліджень Ужгородського національного університету, вул. Далека 2а, Ужгород, 88000, Україна, e-mail: lkd.uzhgorod@gmail.com

²Науково-дослідний інститут «Астрономічна обсерваторія» Одеського національного університету ім. І.І. Мечникова, вул. Маразлієвська, 1В, Одеса, 65014, Україна

³Головна астрономічна обсерваторія, Національної академії наук України, вул. Академіка Заболотного, 27, Київ, 03143, Україна

ПОРІВНЯННЯ ТОЧНОСТЕЙ ПОЛОЖЕНЬ ГЕОСИНХРОННИХ ОБ'ЄКТІВ РІЗНИМ ПРОГРАМНИМ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯМ

Визначення точності отриманих положень геосинхронних об'єктів за допомогою різного програмного забезпечення. Метою було оцінити систематичні і випадкові похибки вимірювань за допомогою програмного забезпечення Apex II та CoLiTecSat. Для оцінки точності роботи програмного забезпечення (ПЗ) було вибрано п'ять геосинхронних супутників для яких можна отримати точну координатну інформацію з сервісів міжнародної мережі лазерної віддалеметрії. Використані астрометричні методи досліджень об'єктів, а також математичні методи обробки результатів. Порівняння результатів проводилось за допомогою пакету Kotlin Orbit Estimation Library. Розглянуто відхилення вздовж та впоперек орбіти положень п'яти супутників отриманих за допомогою ПЗ Apex II та CoLiTecSat. Орбіта супутників була обрахована на основі точної ефемериди з міжнародної мережі лазерної віддалеметрії. Випадкові похибки одного вимірювання ПЗ Apex II та CoLiTecSat на представленому матеріалі відрізняються не суттєво. Відмінності в оцінках середньо квадратичного відхилення (СКВ) для телескопу BRC-250M не дозволяють зробити висновок про те, яке ПЗ забезпечує меншу випадкову помилку вимірювань.

Ключові слова: супутник, координати, похибки, ефемериди.

Вступ

Визначення точних астрометричних координат штучних супутників Землі (ШСЗ), є важливою задачею для побудови орбіти супутників та контролю небезпечних зближень ШСЗ в навколоземному космічному просторі. В статті приведено порівня визначення точності екваторіальних координат геосинхронних ШСЗ за допомогою різного програмного забезпечення – Apex II та CoLiTecSat.

ПЗ Apex II використовується в мережі оптичних спостережень ISON¹ (International

Scientific Optical Network), воно пройшло досить довгий шлях вдосконалень та модифікацій. З іншої сторони тестувалося нещодавно створене ПЗ CoLiTecSAT², що розроблено в Україні.

В якості об'єктів для спостереження вибрані штучні супутники Землі, по яким наявна точна координатна інформація з міжнародної мережі лазерної віддалеметрії.

Опис ефемерид

Представлені порівняння вимірюваних координат ШСЗ з ефемеридами, International Laser

¹<http://astronomer.ru/project-ison.php>

²<http://www.neoastrosoft.com>

³<https://ilrs.cdis.eosdis.nasa.gov/>

⁴<http://www.igs.org/>

Ranging Service (ILRS)³ та Global Navigation Satellite Systems (GNSS)⁴. Обидва сервіси публікують свої ефемериди в виді таблиць моментів часу і відповідних їм декартовим координатам супутника в International Terrestrial Reference Frame (ITRF). Для отримання координат і швидкостей космічного апарата (КА) в потрібний момент часу ці таблиці координат (ефемериди) потрібно інтерполювати.

Ефемериди ILRS, публікуються в форматі Consolidated Prediction Format (CPF) [1]. ILRS ефемерида представляє собою прогноз майбутніх положень супутника по відношенню до моменту фактичних спостережень супутника і моменту її публікації. Отже ILRS ефемерида – це екстраполяція положень супутника в майбутнє. Ці ефемериди охоплюють проміжок часу від однієї доби для низькоорбітальних супутників до 7 діб для високоорбітальних супутників. При цьому точність ефемериди швидко погіршується по мірі віддалення від її початку. Більшість ефемерид перекриваються по часу. Для випадків з КА, що наведені нижче в таблиці 2, проміжок часу однієї ефемериди знаходиться в діапазоні від 4 до 6 діб. Ефемериди для цих КА, як правило, оновлюються раз за добу.

Для обчислення положення супутників на великих інтервалах часу (більше 1 доби) використовується останній прогноз, що передуює даному моменту часу. Таким чином, зазвичай, для визначення положення і швидкості супутника по ILRS ефемеридам використовуються прогнози положення супутника, що відстають від початкової дати прогнозу не більше ніж на одну добу.

Ефемериди, що надаються GNSS і використані нами публікуються в sp3 форматі в системі координат Global Reference Frame (IGb08) [2]. Використані GNSS ефемериди публікуються через тиждень після проведення спостережень. Ці GNSS ефемериди представляють собою апроксимацію спостережень навігаційних супутників з врахуванням вимірних параметрів обертання Землі. Наслідком цього є більш висока точність GNSS

ефемериди в порівнянні з ILRS ефемеридою.

Одна ефемерида, що публікується сервісом GNSS, охоплює проміжок 23 години і 45 хвилин, публікується один раз на добу. Тому, при використанні GNSS ефемерид утворюється розрив в часі між ефемеридами протяжністю в 15 хвилин, зазвичай в районі опівночі по всесвітньому часу. При цьому на краях окремих ефемерид може спостерігатись деяке зниження точності внаслідок крайових ефектів інтерполяції.

Порівняння в термінах вздовж і поперек видимої траєкторії руху супутника

Найбільш важлива особливість оптичних спостережень супутників пов'язана з їх високою рухливістю на зображенні в порівнянні з іншими астрономічними об'єктами. У типовій ситуації видиме зміщення супутника за час експозиції зображення перевищує кутові розміри функції розсіювання точкових об'єктів. Що призводить до витягування зображення супутника уздовж його напрямку руху, якщо телескоп супроводжує зірки, або до витягування зображень зірок, якщо телескоп супроводжує супутник. Таким чином, при обробці зображень виникає виділений напрям, що збігається з напрямком руху супутника.

Крім витягування зображень точкових об'єктів, висока швидкість видимого руху ШСЗ підвищує вимоги до точності вимірювання моментів часу експозиції зображення ШСЗ в порівнянні з типовими вимогами, що пред'являються до астрономічних зображень. Так для низькоорбітальних об'єктів видима кутова швидкість супутника може перевищувати 1000"/сек. Для вимірювання координат такого об'єкта з точністю порядку 0.1", точність вимірювання часу повинна перевищувати 0.0001 секунди. Похибки вимірювання часу будуть проявлятися у вигляді зсуву положення об'єкта уздовж його видимої траєкторії.

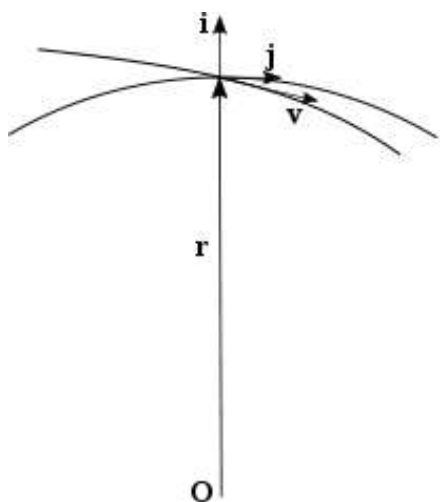


Рис. 1: Система координат вздовж і впоперек видимого шляху супутника. Всі вектори на рисунку лежать в площині рисунка.

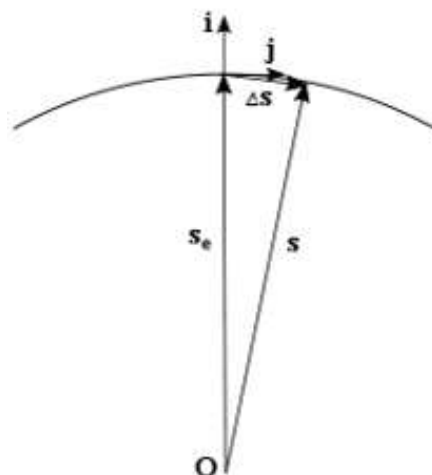


Рис. 2: Розклад вектора нев'язок на dR і dL компоненти.

Табл. 1: Географічні координати і характеристики телескопу BRC-250M

Координати		Характеристики	
φ	48.°563551	D	250 mm
λ	22.°453751	F	1280 mm
h	231.0	роздільна здатність	1.46 ''/pix
		FOV	100'

Табл. 2: Перелік супутників, що спостерігалися

Назва супутника	Norad ID	Висоти супутника (км)
Galileo-102	37847	23220
Galileo-203	40544	23220
Galileo-212	41860	23220
Beidou G5	38091	35800
IRNSS 1B	39635	35800

З огляду на ці особливості бажано розглядати невязки вздовж і впоперек видимого руху супутника. У разі відомих топоцентричних координат супутника $\mathbf{r}$ і його вектора швидкості $\mathbf{v}$ можна ввести миттєву систему координат як (рис. 1)

$$\mathbf{i} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \mathbf{j} = [\mathbf{k} \times \mathbf{i}], \mathbf{k} = \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{v}}{|\mathbf{r} \times \mathbf{v}|} \quad (1)$$

Вектор $\mathbf{k}$ перпендикулярний площині рисунка, $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ – орти системи координат

(вісь x направлена вздовж напрямку на ШСЗ, вісь y співпадає з видимим напрямком руху ШСЗ, вісь z – перпендикулярна видимому напрямку руху ШСЗ); r – довжина вектора $\mathbf{r}$. Вектор нев'язок $\Delta \mathbf{s} = \mathbf{s} - \mathbf{s}_e$ може бути розкладений на координати (dR, dL, dN) в системі координат. Де $\mathbf{s}_e = \mathbf{r}/r$ напрям візування на супутник, а r – довжина вектора $\mathbf{r}$.

Компонент вектора нев'язок dR завжди буде другого порядку по величині, приймаючи до уваги, що довжина вектора нев'язок завжди мала (рис. 2).

Видима кутова швидкість руху ШСЗ визначається як $v_{vis} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{j})/r$. Тоді відставання або випередження ШСЗ по видимому шляху в термінах часу можна оцінити як $dT = dL/v_{vis}$.

Оцінка систематичної і випадкової помилки вимірювань

Для реалізації методів порівняння, використовувалася ПЗ Kotlin Orbit Estimation Library (KOrbEstLib) [3]. Для оцінок величини випадкової і систематичної помилки вимірювань проводилося порівняння вимірювань координат ШСЗ з ефемеридами, що надавалися службами ILRS і GNSS. Точність ILRS для об'єктів, що розглядаються, краще 10м, а GNSS краще 1м.

Набір матеріалу для аналізу проводився на телескопі BRC-250M, що розміщений на станції спостережень Деренівка. Географічні координати і характеристики телескопу наведені в табл. 1. Обробка зображень виконувалася за допомогою програм CoLiTecSAT і Apex II [4]. Список ШСЗ для яких були отримані вимірювання координат представлені в таблиці 2.

У таблиці 3 представлені статистичні оцінки характеристик нев'язок для даних супутників. Для цензурування грубих помилок використовувався поріг $\alpha = 0.001$. Для порівняння оцінок стандартних відхилень (СКВ) нев'язок між результатами вимірювань ПЗ Apex II і CoLiTecSAT обчислювалося відношення:

$$F = \frac{\sigma_{apex}^2}{\sigma_{colitec}^2}, \text{ якщо } \sigma_{apex}^2 > \sigma_{colitec}^2,$$

$$F = \frac{\sigma_{colitec}^2}{\sigma_{apex}^2}, \text{ якщо } \sigma_{apex}^2 < \sigma_{colitec}^2. \quad (2)$$

Далі обчислювалась ймовірність $P_{n-1,m-1}(F)$, того що значення одної оцінки СКВ більше іншої [5], у відповідності з розподілом Фішера, де n, m відповідна кількість вимірювань для кожного ПЗ після процедури цензурування грубих помилок. В таблиці приведена величина $\alpha_F = 1 - P_{n-1,m-1}(F)$.

Кількість вимірювань для ШСЗ Galileo – 102 (37847), Galileo - 203 (40544), Galileo

– 212 (41860), отриманих на телескопі BRC-250M, в кожній серії менше або дещо більше 10 (таблиця. 3). СКВ одного вимірювання сильно варіюються від супутника до супутника, що викликано малою кількістю вимірювань. По-перше, мала кількість вимірювань перешкоджає виявленню грубих помилок. А по-друге, грубі помилки у свою чергу можуть призводити до істотно завищених оцінок СКВ.

Для геосинхронного ШСЗ IRNSS 1b (41860) на телескопі BRC-250M було отримано більше 20 вимірювань, що вже дозволило виявити і відкинути ряд грубих помилок вимірювань. Серед вимірювань, що брали участь у порівнянні з ефемеридами, у CoLiTecSAT було виявлено три грубих помилки, а у Apex II одна. При цьому Apex II відкинув на одну грубу помилку більше ніж CoLiTecSAT на попередньому етапі, до порівняння з ефемеридою.

У таблиці 3 також представлені оцінки СКВ для геостационарного ШСЗ Beidou G5 (38091). Для Apex II було виявлено 5 грубих помилок з 52 вимірювань, а для CoLiTecSAT 3 грубих помилки при тій же кількості вимірювань.

Висновки

У всіх розглянутих випадках, коли вимірювання проводилися за допомогою Apex II і CoLiTecSAT, оцінка величини α_F не становила менше 0,001. Таким чином, відмінності в оцінках СКВ по BRC-250M не дозволяють зробити висновок про те, яке ПЗ забезпечує меншу випадкову помилку вимірювань.

Оцінки СКВ одного вимірювання уздовж видимого шляху ШСЗ знаходяться в діапазоні від 0.33" до 1.8", поперечному напрямі – від 0.1" до 1.9". Мала кількість вимірювань і досить високий рівень СКВ одного вимірювання не дозволяють зробити однозначний висновок про наявність або відсутність систематичних зміщень між вимірюваннями і ефемеридою. Відносно високий рівень СКВ може бути обумовлений низьким рівнем роздільності, оскільки усі зображення були отримані при бініруванні 2, що призводить до оцінки кутової роздільно-

Табл. 3: Статичні характеристики нев'язок для спостережуваних ШСЗ

Супутник	Дата YYYYMMDD	Програма обробки	dL (arcsec) сер. σ	dN (arcsec) сер. σ	dT (sec) сер. σ	N ($\alpha > 0.001$)
37847	20181105	Apex II	-1.375	0.337	-0.046	5(5)
	20181105	CoLiTecSAT α_F	-1.054	0.997 0.13	-0.035	7(7)
40544	20181024	Apex II	-1.293	0.604	-0.044	28(28)
	20181024	CoLiTecSAT α_F	-1.986	1.819 0.0052	-0.068	18(18)
39635	20181024	Apex II	-0.947	1.166	-0.064	28(27)
	20181024	CoLiTecSAT α_F	-0.999	0.856 0.22	-0.068	29(26)
41860	20181031	Apex II	-0.562	0.876	-0.019	5(5)
	20181031	CoLiTecSAT α_F	-2.686	1.322 0.34	-0.095	10(10)
38091	20181024	Apex II	-1.049	1.077	-0.070	28(23)
	20181024	CoLiTecSAT α_F	-1.107	1.289 0.34	-0.074	28(25)
	20181031	Apex II	-0.708	0.694	-0.048	20(20)
	20181031	CoLiTecSAT α_F	-0.648	1.396 0.07	-0.044	20(20)
	20181105	Apex II	-0.876	0.414	-0.059	4(4)
	20181105	CoLiTecSAT α_F	-0.656	0.368 0.44	-0.044	4(4)

сті зображення 2.9"/pix. Таким чином СКВ в перерахунку до пікселів знаходиться в діапазоні від 0.11 до 0.66, що порівняно за величиною з результатами для телескопів з великою кутовою роздільною здатністю.

Можна зробити висновок, що випадкові похибки одного вимірювання ПЗ CoLiTecSAT і Apex II на представленому матеріалі відрізняється не суттєво.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Ricklefs R.L. Consolidated Laser Ranging Prediction Format Version 1.01 [Електронний ресурс] / R.L. Ricklefs // ILRS report – 2006. – Режим доступу: https://ilrs.cddis.eosdis.nasa.gov/docs/2006/cpf_1.01.pdf.
- [2] Crespi M. Global and local reference frames / M. Crespi, A. Mazzoni, G. Colosimo // Rendiconti Lincei. – 2015. – V. 26 (Suppl. 1). – P. 25–31.
- [3] Shakun L. S. Features of Kotlin Orbit Estimation Library / L.S. Shakun // Odessa Astronomical Publications. – 2018. – V. 31. – P. 191 – 195.
- [4] Devyatkin A. V. Apex I and Apex II software packages for the reduction of astronomical CCD observations / A.V. Devyatkin, D.L. Gorshanov, V.V. Kouprianov, I.A. Verestchagina // Solar System Research. – 2010. – V. 44 (1). – P. 68–80.
- [5] Lehmann E.L. Testing statistical hypotheses / E.L. Lehmann, J. P. Romano – Springer Science & Business Media. – 2006. – 408 p.

Стаття надійшла до редакції 09.07.2019

В.И. Кудак¹, Л.С. Шакур², В.М. Периг¹, В.Е. Саваневич³

¹Лаборатория космический исследований Ужгородського національного университета, ул. Далекая 2а, Ужгород, 88000, Украина, e-mail: lkd.uzhgorod@gmail.com

²Научно-Исследовательский институт «Астрономическая обсерватория» Одеського национального университета им. И.И. Мечникова, ул. Маразлиевская, 1В, Одеса, 65014, Украина

³Главная астрономическая обсерватория, Национальной академии наук Украины, ул. Академика Заболотного, 27, Киев, 03143, Украина

СРАВНЕНИЕ ТОЧНОСТЕЙ ПОЛОЖЕНИЙ ГЕОСИНХРОННОЙ ОБЪЕКТОВ РАЗЛИЧНЫМ ПРОГРАММНЫМ ОБЕСПЕЧЕНИЕМ

Определение точности полученных положений геосинхронной объектов с помощью различного программного обеспечения. Целью было оценить систематические и случайные погрешности измерений с помощью программного обеспечения Apex II и CoLiTecSat. Для оценки точности работы программного обеспечения (ПО) было выбрано пять геосинхронной спутников для которых можно получить точную координатную информацию из сервисов международной сети лазерной локации. Использованы астрометрические методы исследования объектов, а также математические методы обработки результатов. Сравнение результатов проводилось с помощью пакета Kotlin Orbit Estimation Library. Рассмотрены отклонения вдоль и поперек орбиты положений пяти спутников полученных с помощью ПО Apex II и CoLiTecSat. Орбита спутников была рассчитана на основе точной ефемериды по международной сети лазерной локации. Случайные погрешности одного измерения

ПО Apex II и CoLiTecSat на представленном материале отличаются не существенно. Различия в оценках средне квадратического отклонения (СКО) для телескопа BRC-250M не позволяют сделать вывод о том, какое ПО обеспечивает меньшую случайную ошибку измерений.

Ключевые слова: спутник координаты погрешности эфемериды.

V.I. Kudak¹, L.S. Shakun², V.M. Perig¹, V.E. Savanevych³

¹Laboratory of space research, Uzhhorod national university, 2a Daleka Street, 88000 Uzhhorod, Ukraine, e-mail: lk.d.uzhgorod@gmail.com

²Astronomical observatory of Odessa National University, 1B Marazlievskaya street, 65014 Odessa, Ukraine

³Main Astronomical Observatory of the NAS of Ukraine, 27 Akademika Zabolotnogo Street, 03143 Kyiv, Ukraine

COMPARISON OF THE GEOSYNCHRONOUS OBJECTS POSITION ACCURACY WITH DIFFERENT SOFTWARE

Purpose. Determinate the accuracy of the received positions of geosynchronous objects with the help of different software. Evaluate systematic and random measurement errors using the Apex II and CoLiTecSat software. To evaluate the accuracy of the software, five geosynchronous satellites were selected for which accurate coordinate information can be obtained from the services of the international network of laser ranging.

Methods. Used astrometric methods of objects research, as well as mathematical methods of processing results. The results were compared using the Kotlin Orbit Estimation Library.

Results. Deviations along and across the orbits of the positions of the five satellites obtained using the Apex II and CoLiTecSat software are considered. Satellite orbits were calculated on the basis of exact ephemeris from the international network of laser ranging.

Conclusions. Random errors of one measure of software Apex II and CoLiTecSat on the presented material differ significantly. The differences in the estimation of root mean square (RMS) on BRC-250M do not allow to conclude which software provides a smaller random measurement error.

Keywords: satellite, coordinates, errors, ephemeris.

REFERENCES

- [1] Ricklefs, R.L. (2006), «Consolidated Laser Ranging Prediction Format Version 1.01», ILRS report, available at: https://ilrs.cddis.eosdis.nasa.gov/docs/2006/cpf_1.01.pdf.
- [2] Crespi, M., Mazzoni, A., Colosimo, G. (2015), «Global and local reference frames», Rendiconti Lincei, V. 26, Suppl.1, pp. 25–31.
- [3] Shakun, L.S. (2018), «Features of Kotlin Orbit Estimation Library», Odessa Astronomical Publications, V. 31, pp. 191–195.
- [4] Devyatkin, A.V., Gorshanov, D.L., Kouprianov, V.V., Verestchagina, I.A. (2010), «Apex I and Apex II software packages for the reduction of astronomical CCD observations», Solar System Research, V. 44, Iss. 1, pp. 68–80.
- [5] Lehmann, E.L., Romano, J. P. (2006), Testing statistical hypotheses, Springer Science & Business Media, 408 p.

УДК 520.82, 520.88
PACS 95.85.Kr, 96.25.De, 96.25.Vt
DOI 10.24144/2415-8038.2019.45.141-148

А.М. Кожухов¹, С.В. Рыщенко¹, Т.А. Дементьев¹, В.П. Епишев²,
И.И. Мотрунич², И.Ф. Найбауэр², В.М. Периг², В.И. Кудак², Д.М. Кожухов³,
О.Н. Пискун³

¹Центр приема и обработки специальной информации и контроля навигационного поля, с. Залесцы, Дунаевецкий р-н, Хмельницкая обл., Украина, 32444, e-mail: a.m.kozhukhov@gmail.com

²Лаборатория космических исследований Ужгородского национального университета, Ужгород, Украина, e-mail: lk.d.uzhgorod@gmail.com

³Национальный центр управления и испытаний космических средств, Киев, Украина

ОЦЕНКА СОСТОЯНИЯ КОСМИЧЕСКИХ АППАРАТОВ ТИПА CUBESAT ПО ОПТИЧЕСКИМ НАБЛЮДЕНИЯМ (НА ПРИМЕРЕ КА ARKYD 6A)

Фотометрия низькоорбитальних искусственных спутников, сверхмалого размера представляет собой сложную задачу, которая требует комплексного подхода в ее решении. Целью было определить параметры собственного вращения искусственного спутника ARKYD 6A, исходя из фотометрической и астрометрической информации полученной на квантово-оптической станции (КОС) «Сажень-С» Центра приема и обработки специальной информации и контроля навигационного поля Национального центра управления и испытаний космических средств. Авторами использованы фотометрические и астрометрические методы исследований объекта, а также другие методы моделирования и собственные методы определения ориентации космического аппарата. Приведены результаты фотометрических наблюдений космического аппарата (КА) ARKYD 6A, которые были проведены в мае 2018 года. Несмотря на сложные условия наблюдений были получены три кривые блеска КА. Анализ кривых показал, что КА потерял стабилизацию и вращается. Определены ориентировочные параметры вращения КА. Показана возможность фотометрических наблюдений сверхмалых КА на низких высотах телескопами с малой апертурой. Анализ полученных в течении трех ночей наблюдений показал, что КА ARKYD 6A вращается вокруг линии «зенит – надир» с периодом ~ 145 с. При этом его продольная ось отклонена от данной линии на угол $32^\circ - 35^\circ$.

Ключевые слова: низькоорбитальні космічні об'єкти, космічні апарати типу CubeSat, фотометричні спостереження.

Введение

На сегодня существует тенденция по резкому увеличению количества запускаемых и планируемых к запуску на низкую околоземную орбиту малых космических аппаратов (КА). К 2026 году ожидается увеличение мировой орбитальной группировки до 9000 и более КА, большую часть которых будут составлять малые и сверхмалые (мини-, микро- и наноспутники) КА, в частности стандарта CubeSat с различным

форм-фактором (от 1U до 12U) и весом от 1 до 100 кг. Такие КА имеют малые размеры, но обладают высокой функциональностью, позволяющей заменить большинство своих более крупных «коллег». Кроме того, данная технология позволяет сравнительно дешево создавать многоспутниковые орбитальные группировки для обеспечения беспрецедентной оперативности получения информации. Однако, ввиду малых размеров таких КА, существует проблема контроля их состояния в случае потери с ними связи или

возникновения иных нештатных ситуаций. Особенно актуальна такая задача для экспериментальных КА – демонстраторов технологий.

В рамках данного исследования был проведен эксперимент по мониторингу состояния КА ARKYD 6A (международный номер 18004V, стандарт CubeSat 6U) при помощи сравнительно небольшого оптического инструмента, оснащенного современным светоприемным оборудованием.

Методика проведения и первичной обработки наблюдений

Используемая аппаратура. Наблюдения проводились при помощи канала широко-

кого поля модернизированной аппаратуры электронной регистрации оптических наблюдений (АЭРОН-М) квантово-оптической станции (КОС) «Сажень-С» Центра приема и обработки специальной информации и контроля навигационного поля (ЦПОСИ и КНП) Национального центра управления и испытаний космических средств (НЦУИКС) Государственного космического агентства (ГКА) Украины. Канал оснащен короткофокусным светосильным телескопом АФР-М ($D = 300$ мм, $F = 300$ мм), с КМОП камерой ZWO ASI-174MM-Cool (mono) [1]. Характеристики телескопа и камеры приведены в табл. 1 и 2, соответственно.

Табл. 1: Характеристики телескопа АФР-М

1	Диаметр объектива, мм	300
2	Фокусное расстояние, мм	300
3	Концентрация 80% световой энергии в пикселе размером, мкм	Не более 11
4	Диаметр линейного поля зрения, мм	Не менее 52

Табл. 2: Характеристики КМОП камеры ZWO ASI-174MM-Cool (mono)

1	Светоприемный детектор	1/1.2" CMOS IMX174LLJ / IMX174LQJ
2	Размеры детектора, мм	11,3 x 7,1
3	Максимальная разрешающая способность, пикселей	1936x1216
4	Размер пикселя, мкм	5,86
5	Диапазон экспозиций, с	От 0,03 до 1000
6	Разрядность АЦП, бит	10 или 12
7	Интерфейс управления и передачи данных	USB 3.0
8	Скорость регистрации при максимальном разрешении и максимальной разрядности АЦП	Не более 128 кадров/с, в зависимости от экспозиции.

В максимальном разрешении телескоп с данной камерой обеспечивают масштаб 4"/пиксель в поле зрения 129'x81'.

Телескоп установлен на монтировке телескопа АЗТ-28 КОС «Сажень-С». Монтировка имеет максимальную скорость перемещения до 2,5°/с и способна сопровождать КА

на низких орбитах.

Проведение наблюдений. Наблюдения КА проводились в режиме сопровождения. Начальные условия для расчета целеуказаний брались в виде двустрочных элементов (Two Line Elements — TLE) из базы данных Объединенного космическо-

го командования Вооруженных сил США (<https://www.space-track.org>).

Оператор, проводящий сеанс наблюдений, обнаруживал КА в поле зрения, после чего начинал запись наблюдений. Запись проводилась в виде последовательности отдельных кадров в формате FITS (Flexible Image Transport System). Экспозиция подбиралась таким образом, чтобы КА был достаточно хорошо виден оператором.

Условия наблюдений были сложными. На небе местами проявлялась облачность. Во время нескольких проходов часть траектории КА проходила около Луны, что также служило препятствием для качественного проведения наблюдений. Дополнительно усложняло работу дрожание монтировки в некоторых положениях, из-за высокой скорости перемещения КА. Совокупность данных факторов привела к тому, что с 11 по 22

мая 2018 года были получены качественные наблюдения всего трех проходов (табл. 3), другие были отбракованы на этапе предварительной обработки.

Предварительная обработка наблюдений. На кадрах, признанных пригодными для дальнейшей обработки, проводилась предварительная оценка инструментального блеска КА методом апертурной фотометрии программой Tangra 3.6¹. Полученная кривая инструментального блеска ИСЗ после этого анализировалась для отбраковки сбойных и аномальных измерений. Причиной могли быть наличие дымки, уменьшавшей блеск КА, прохождение через апертуру яркой звезды, увеличение уровня фона из-за близости Луны и т.п. Количество оставшихся после данной отбраковки оценок блеска для каждого прохождения представлено в табл. 3.

Табл. 3: Результаты наблюдений КА ARKYD 6A

Дата	Общая длительность наблюдений мин:с	Экспозиция с	Общее количество кадров	Количество оценок блеска
11.05.2018	3:44.8	0.20	746	677
16.05.2018	2:49.8	0.19	755	644
22.05.2018	1:39.0	0.30	324	321

Отобранные серии кадров, оценка блеска ИСЗ, а также начальные условия для получения целеуказаний передавались для дальнейшего анализа специалистам Лаборатории космических исследований Ужгородского национального университета (ЛКИ УжНУ).

Анализ полученных данных

Для оперативной оценки поведения ИСЗ Arkyd 6A достаточным оказалось 3-х фотометрических записей, которые представлены на рис. 1. Без редукиции к так называемым стандартным условиям видно, что у

КА нарушена стабилизация, и он вращается. Наиболее удачная запись блеска спутника была осуществлена 11.05.2018 года, по результатам которой удалось довольно надежно оценить период обнаруженного вращения ИСЗ, равным временному интервалу между двумя одинаковыми по форме и по амплитуде подъемами блеска (рис. 2). И хотя записи блеска в другие даты менее удачны, они практически подтвердили полученный ранее результат. Определение величины периода вращения проводился с использованием разработанного в ЛКИ УжНУ программного обеспечения основанного на известном методе Ломба-Скрагла [2]. В результате среднее его значение на интервале наблюдений было равно $P = (145.0 \pm 1.5)$ сек.

¹<http://www.hristopavlov.net/Tangra3/>

Фотометрическая запись блеска КА за 16.05.2018 года оказалась удачной в ином плане. На ней зафиксирован в 20h12m50s зеркальный всплеск блеска на момент которого в дальнейшем было вычислено направление нормали к отражающей зеркально детали поверхности объекта (рис. 3). Расчет проводился в спутникоцентрической системе экваториальных координат. Соответственно, были рассчитаны направления

«спутник – Солнце», «спутник – наблюдатель», «спутник – центр Земли», углы освещения объекта Солнцем и углы отражения света от его поверхности, а также угол между направлениями «спутник – центр Земли» и нормалью. Все расчеты выполнялись с помощью специального программного обеспечения «Orientation», разработанного в ЛКИ УжНУ [3].

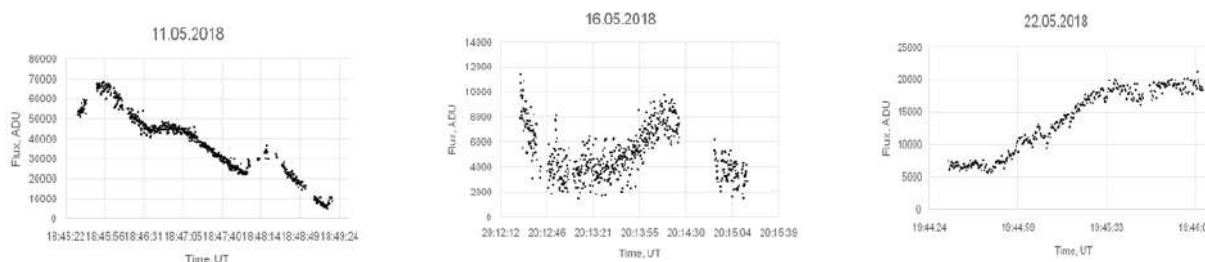


Рис. 1: Результаты предварительной обработки наблюдений КА ARKYD 6A – инструментальные кривые блеска для трех проходов.

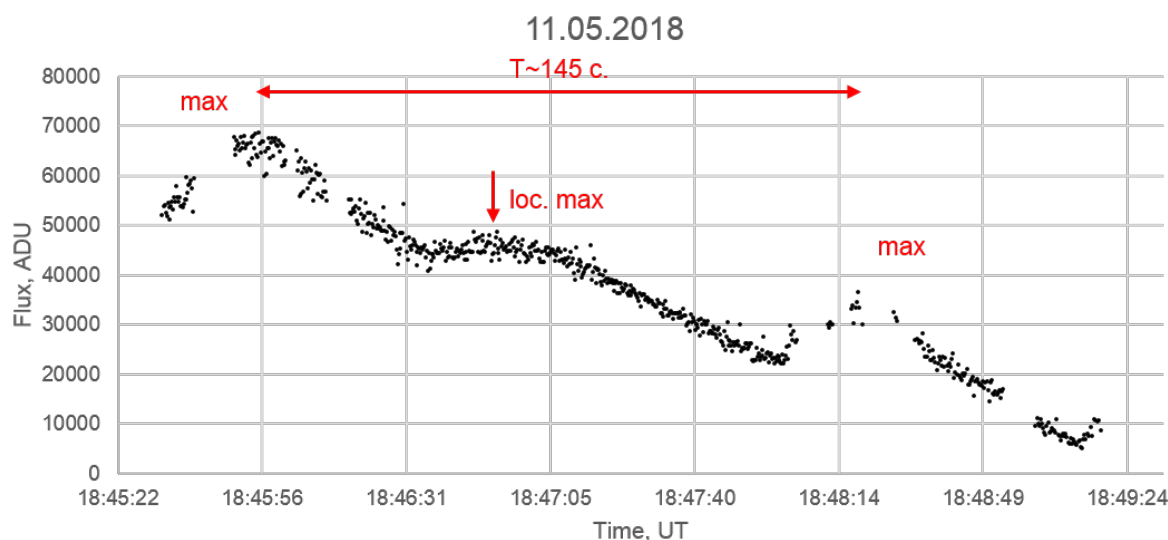


Рис. 2: Анализ кривой блеска за 11.05.2018.

Точность определения углов и направлений определяется точностью позиционных наблюдений объекта. Если есть позиционные ПЗС-наблюдения, где точность составляет несколько угловых секунд, то все направления могут быть рассчитаны с точностью $\sim 0^\circ.1$. Однако, если позиционные данные вычисляются из элементов TLE, то-

чность может снизиться почти до $1^\circ.0$. В нашем случае набор TLE был достаточно точным и погрешность вычислений была порядка $0^\circ.5$.

Кроме того, программное обеспечение позволяет вычислять на заданные моменты времени положения КА в азимутальной системе координат. Это помогает наблюдателю

определится, какую часть поверхности ИСЗ он видит в интересующийся его момент времени.

В нашем случае зеркальный всплеск произошел в минимуме блеска, то есть, когда КА был развернут в сторону наблюдателя и Солнца минимальной площадью поперечного его сечения. Исходя из предоставленного изображения строения данного ИСЗ, уве-

ренно можно сказать, что он был развернут к наблюдателю торцевой своей частью, а зеркальный блик произошел от объектива фотоаппарата, размещенного на этом участке корпуса КА. Таким образом, направление нормали в момент зеркального всплеска отображает направление продольной оси корпуса ИСЗ по отношению к наблюдателю и оси «центр спутника – центр Земли».

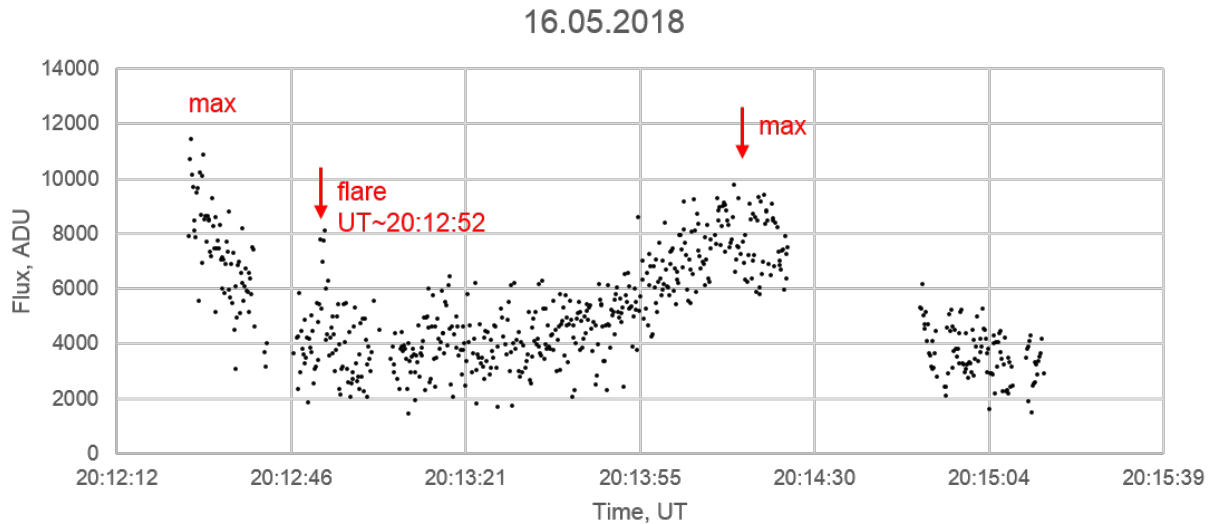


Рис. 3: Анализ кривой блеска за 16.05.2018.

Направление в пространстве нормали $\vec{n}$ к любой отражающей поверхности зер-

кального типа рассчитывается следующим образом:

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \\ z_n \end{pmatrix} = [(x_0 + x_{obs})^2 + (y_0 + y_{obs})^2 + (z_0 + z_{obs})^2]^{-1/2} \cdot \begin{pmatrix} x_0 + x_{obs} \\ y_0 + y_{obs} \\ z_0 + z_{obs} \end{pmatrix} \quad (1)$$

где $x_0 = \cos \alpha_0 \cos \delta_0$; $y_0 = \sin \alpha_0 \cos \delta_0$; $z_0 = \sin \delta_0$ – соответствуют направлению из центра спутника к центру Солнца, а $x_{obs} = \cos \alpha_{obs} \cos \delta_{obs}$; $y_{obs} = \sin \alpha_{obs} \cos \delta_{obs}$; $z_{obs} = \sin \delta_{obs}$ – направлению от центра спутника к наблюдателю. α_0 и δ_0 , α_{obs} и δ_{obs} являются, соответственно, координатами Солнца и наблюдателя в экваториальной спутникоцентрической системе координат. α_{obs} и δ_{obs} вычисляются по синхронному позиционному наблюдению объекта и связаны с топоцентрическими его координатами как $\alpha_{obs} = \alpha_t \pm 180^\circ$; $\delta_{obs} = -\delta_t$.

Модельный анализ видимого вращения ИСЗ Arkyd 6A в сочетании с видом записанных кривых блеска, показал, что оно осуществлялось именно вокруг оси «центр спутника – центр Земли».

Если спутник вращается вокруг своей вертикальной оси, которая лежит в плоскости его орбиты, то ее направление может быть определено, как: $\alpha_R = \alpha \pm 180^\circ$; $\delta_R = -\delta$, где α , δ – геоцентрические экваториальные координаты наблюдаемого объекта.

Результаты вычислений на момент зеркального всплеска приведены на рис 4. Здесь

угол освещения спутника Солнцем ϵ равен углу отражения света в сторону наблюдателя и его значение по величине равно $\epsilon = 44^\circ.3$. А угол между направлением нормали и осью «центр спутника - центр Земли» ра-

вен $\sim 32\text{--}35^\circ$ (точность обусловлена шириной и амплитудой зеркального блика). В нижней части рисунка схематично изображено движение в пространстве продольной оси КА Arkyd 6A.

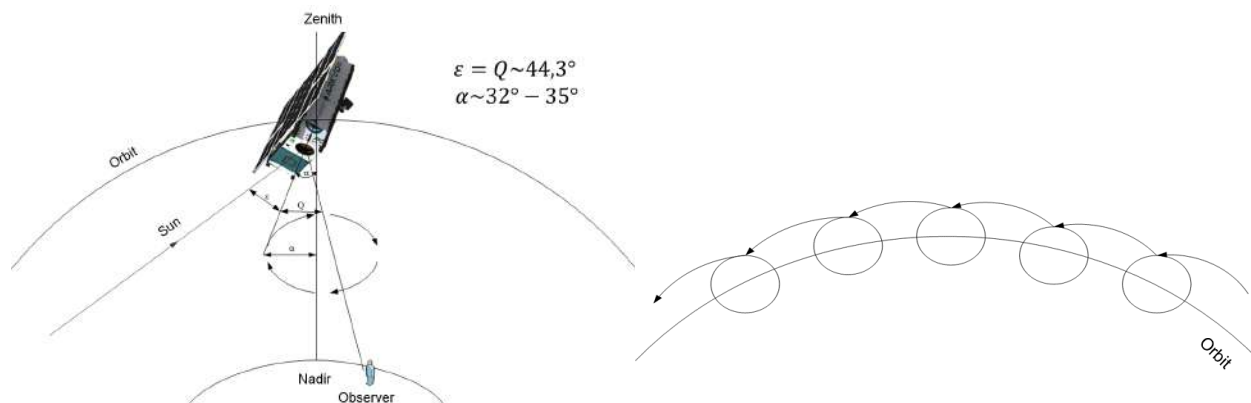


Рис. 4: Анализ вращения и след оси вращения КА ARKYD 6A на небесной сфере.

Выводы

1. КА ARKYD 6A имеет малую яркость и высокую скорость видимого движения, что усложняло проведение его наблюдений.
2. Дополнительными сложностями при проведении наблюдений были: облачность, механический дрейзг телескопа, наличие на небе Луны.
3. Анализ полученных в течение трех ночей наблюдений показал, что КА ARKYD 6A по-

терял стабилизацию и вращается вокруг линии «зенит-надир» с периодом примерно 145 с. При этом его продольная ось отклонена от данной линии на угол в $32^\circ - 35^\circ$.

4. Наблюдения в целом подтвердили возможность оценки состояния низкоорбитальных наноспутников типа CubeSat, используя телескопы с малой апертурой. Учитывая рост количества подобных КА на орбите Земли, такая оценка является востребованной.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Maigurova N. Results from optical CCD observations of asteroid 2014 JO25 during its close approach to the Earth on April 19, 2017 / Maigurova N., Pomazan A., Kozhuhov O. // Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. – 2017. – V. 56(2). – P. 22 – 25.
- [2] Scargle J. D. Studies in astronomical time series analysis. II-Statistical aspects of spectral analysis of unevenly spaced data. / Scargle, J. D. // The Astrophysical Journal. – 1982. – V. 263, – P. 835 – 853.
- [3] Епішев В.П. Исследование ориентации и поверхности ИНТ методом электрофотометрии: дис. кандидата физико-математических наук: 01.03.02 / Епішев Виталий Петрович. – Одесса. 1985. – 157 с.

Стаття надійшла до редакції 09.07.2019

О.М. Кожухов¹, С.В. Рищенко¹, Т.О. Дементьев¹, В.П. Єпішев²,
І.І. Мотрунич², І.Ф. Найбауер², В.М. Періг², В.І. Кудак², Д.М. Кожухов³,
О.М. Піскун³

¹Центр прийому і обробки спеціальної інформації а контролю навігаційного поля, с. Залісці, Дунаєвецький р-н, Хмельницька обл., Україна, 32444, e-mail: a.m.kozhukhov@gmail.com.

²Лабораторія космічних досліджень Ужгородського національного університету, Ужгород, Україна, e-mail: lkd.uzhgorod@gmail.com

³Національний центр управління та випробувань космічних засобів, Київ, Україна

ОЦІНКА СТАНУ КОСМІЧНИХ АПАРАТІВ ТИПУ CUBESAT ЗА ОПТИЧНИМИ СПОСТЕРЕЖЕННЯМИ (НА ПРИКЛАДІ КА ARKYD 6A)

Фотометрія низькоорбітальних штучних супутників, надмалого розміру являє собою складну задачу, що потребує комплексного підходу у її вирішенні. Цілю було визначити параметри власного обертання штучного супутника ARKYD 6A, виходячи з фотометричної та астрометричної інформації отриманої на квантово-оптичній станції (КОС) «Сажень-С» Центру прийому і обробки спеціальної інформації та контролю навігаційного поля Національного центру управління та випробувань космічних засобів. Авторами використані фотометричні та астрометричні методи досліджень об'єкта, а також інші методи моделювання та власні методи визначення орієнтації космічного апарата. Приведені результати фотометричних спостережень космічного апарату (КА) ARKYD 6A, які були проведені у травні 2018 р. Не дивлячись на складні умови спостережень, були отримані три криві блиску КА. Аналіз кривих показав, що КА втратив стабілізацію й обертається. Визначені орієнтовні параметри обертання КА. Показана можливість фотометричних спостережень надмалих КА на низьких висотах телескопами з малою апертурою. Аналіз отриманих на протязі трьох ночей спостережень показав, що КА ARKYD 6A обертається навколо лінії «зеніт – надир» з періодом ~ 145 с. При цьому його повздовжня вісь відхилена від даної лінії на кут $32^\circ - 35^\circ$.

Ключові слова: низькоорбітальні космічні об'єкти, космічні апарати типу CubeSat, фотометричні спостереження.

О.М. Kozhukhov¹, S.V. Rishchenko¹, T.A. Dementiev¹, V.P. Yepishev²,
I.I. Motrunich², I.F. Neubauer², V.M. Perig², V.I. Kudak², D.M. Kozhukhov³,
O.M. Piskun³

¹Center for Special Information Reception and Processing and Navigation Field Control of the National Space Facilities Control and Test Center, Zalitsi, Ukraine, e-mail: a.m.kozhukhov@gmail.com

²Laboratory of space researches, Uzhhorod National University, Uzhhorod, Ukraine, e-mail: lkd.uzhgorod@gmail.com

³National Space Facilities Control and Test Center, Kyiv, Ukraine

STATE IDENTIFICATION OF CUBESAT-TYPE SATELLITES BY OPTICAL OBSERVATIONS (ON THE EXAMPLE OF ARKYD 6A SPACECRAFT)

Purpose. Determine the parameters of the own rotation of the artificial satellite ARKYD 6A, based on photometric and astrometric information obtained at the Sazhen-S quantum-optical station (COS) at the Center for the reception and processing of special information and control of the navigation field of the National Space Facilities Control and Test Center.

Methods. The authors used photometric and astrometric methods of research of the object, as well as other methods of modeling and their own methods for determining the orientation of the spacecraft.

Results. The results of photometric observations of the spacecraft ARKYD 6A carried out in May 2018. Despite the difficult observational conditions, three light curves of the spacecraft were obtained. Analysis of the curves showed that the spacecraft lost its stabilization and rotates. The approximate rotation parameters of the spacecraft are determined. The possibility of photometric observations of ultra-small spacecraft at low altitudes with small aperture telescopes is shown.

Conclusion. An analysis of observations obtained over three nights showed that the ARKYD 6A revolves around the «zenith-nadir» line with a period ~ 145 seconds. At the same time, its longitudinal axis is discarded from this line at an angle of $32^\circ - 35^\circ$.

Keywords: low orbit artificial space objects, CubeSat satellites, photometrical observations.

REFERENCES

- [1] Maigurova, N., Pomazan, A., Kozhuhov, O. (2017), «Results from optical CCD observations of asteroid 2014 JO25 during its close approach to the Earth on April 19, 2017», Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv, V. 56(2), pp. 22–25.
- [2] Scargle, J. D. (1982), «Studies in astronomical time series analysis. II-Statistical aspects of spectral analysis of unevenly spaced data», The Astrophysical Journal, V. 263, pp. 835–853.
- [3] Epishev, V.P. (1985), The research of orientation and surface of artificial space body by electrophotometry method: dissertation thesis [Issledovaniye oriyentatsii i poverkhnosti INT metodom elektrofotometrii: dis. kand. fiz.-mat. nauk], Odessa, 157 p.

©Ужгородський національний університет