

ISSN 2312-4334

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE

# **East European Journal of Physics**

No 4. 2022

2022

# East European Journal of Physics

EEJP is an international peer-reviewed journal devoted to experimental and theoretical research on the nuclear physics, cosmic rays and particles, high-energy physics, solid state physics, plasma physics, physics of charged particle beams, plasma electronics, radiation materials science, physics of thin films, condensed matter physics, functional materials and coatings, medical physics and physical technologies in an interdisciplinary context.

Published quarterly in hard copy and online by V.N. Karazin Kharkiv National University Publishing  
ISSN 2312-4334 (Print), ISSN 2312-4539 (Online)

The editorial policy is to maintain the quality of published papers at the highest level by strict peer review.

Approved for publication by the Academic Council of the V.N. Karazin Kharkiv National University (25.11.2022, Protocol no. 18).

EEJP registered by the order of Ministry of Education and Science of Ukraine No. 1643 of 28.12.2019, and included in the list of scientific professional editions of Ukraine (category "A", specialty: 104, 105), in which can be published results of dissertations for obtaining Ph.D. and Dr. Sci. degrees in physical and mathematical sciences.

The Journal is a part of the Web of Science Core Collection (ESCI) scientometric platform and indexed by SCOPUS.

## Editor-in-Chief

☉ Azarenkov M.O., *Academician of NAS of Ukraine, Professor, NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Kharkiv, Ukraine*

## Deputy editor

☉ Girka I.O., *Corresponding Member of NAS of Ukraine, Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine*

## Editorial Board

- ☉ Adamenko I.M., *Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine*
- ☉ Antonov A.N., *D.Sc., Professor, Institute of Nuclear Research and Nuclear Energy, Sofia, Bulgaria*
- ☉ Barannik E.O., *D.Sc., Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine*
- ☉ Beresnev V.M., *D.Sc., Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine*
- ☉ Berezhnoy Yu.A., *D.Sc., Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine*
- ☉ Bizyukov A.A., *D.Sc., Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine*
- ☉ Bragina L.L., *D.Sc., Professor, STU "Kharkiv Polytechnic Institute", Ukraine*
- ☉ Broda B., *D.Sc., University of Lodz, Poland*
- ☉ Dragovich B.G., *D.Sc., University of Belgrade, Serbia*
- ☉ Duplij S.A., *D.Sc., Center für Information Technology (ZIV), Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Münster, Germany*
- ☉ Garkusha I.E., *Corresponding Member of NAS of Ukraine, NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine*
- ☉ Grekov D.L., *D.Sc., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine*
- ☉ Karnaukhov I.M., *Academician of NAS of Ukraine, NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine*
- ☉ Korchin A.Yu., *Corresponding Member of NAS of Ukraine, NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine*
- ☉ Lazurik V.T., *D.Sc., Professor, V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine*
- ☉ Mel'nik V.N., *D.Sc., Institute of Radio Astronomy, Kharkiv, Ukraine*
- ☉ Merenkov N.P., *D.Sc., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine*
- ☉ Neklyudov I.M., *Academician of NAS of Ukraine, NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine*
- ☉ Noterdaeme J.-M., *D.Sc., Max Planck Institute for Plasma Physics, Garching, Germany*
- ☉ Nurmagambetov A.Yu., *D.Sc., Professor, NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine*
- ☉ Ostrikov K.N., *D.Sc., Plasma Nanoscience Centre Australia, Clayton, Australia*
- ☉ Pilipenko M.M., *D.Sc. in Technical Sciences, NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine*
- ☉ Radinschi I., *D.Sc., Gheorghe Asachi Technical University, Iasi, Romania*
- ☉ Slyusarenko Yu.V., *Academician of NAS of Ukraine, NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine*
- ☉ Smolyakov A.I., *University of Saskatchewan, Saskatoon, Canada*
- ☉ Shul'ga M.F., *Academician of NAS of Ukraine, NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine*
- ☉ Tkachenko V.I., *D.Sc., NSC Kharkiv Institute of Physics and Technology, Ukraine*

## Executive Secretary

☉ Hirnyk S.A., *Ph.D., V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine*

## Editorial office

Department of Physics and Technologies, V.N. Karazin Kharkiv National University

Kurchatov av., 31, office 402, Kharkiv, 61108, Ukraine

Tel: +38-057-335-18-33,

E-mail: [eejp@karazin.ua](mailto:eejp@karazin.ua),

Web-pages: <http://periodicals.karazin.ua/eejp> (Open Journal System)

Certificate of State registration No.20644-10464P, 21.02.2014

# Східно-європейський фізичний журнал

Східно-європейський фізичний журнал – міжнародний рецензований журнал, присвячений експериментальним і теоретичним дослідженням ядерної фізики, космічних променів і частинок, фізики високих енергій, фізики твердого тіла, фізики плазми, фізики пучків заряджених частинок, плазмової електроніки, радіаційного матеріалознавства, фізики тонких плівок, фізики конденсованої речовини, функціональних матеріалів та покриттів, медичної фізики та фізичних технологій у міждисциплінарному контексті.

Видається щоквартально в друкованому вигляді та в Інтернеті видавництвом Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна

ISSN 2312-4334 (Друкована версія), ISSN 2312-4539 (Онлайн)

Редакційна політика полягає у підтримванні якості опублікованих статей на найвищому рівні шляхом суворої експертної оцінки. Схвалено до друку Вченою радою Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна (25.11.2022 р., Протокол № 18).

Східно-європейський фізичний журнал зареєстровано наказом Міністерства освіти і науки України № 1643 від 28.12.2019 та включено до Переліку наукових фахових видань України (категорія «А», спеціальність: 104, 105), у яких може публікуватися результати дисертацій на здобуття ступенів кандидата та доктора фізико-математичних наук.

Журнал є частиною наукометричної платформи Web of Science Core Collection (ESCI) і індексується SCOPUS.

## Головний редактор

Азаренков Н.А., академік НАН України, професор, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків, Україна

## Заступник редактора

Гірка І.О., член-кореспондент НАН України, професор, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків, Україна

## Editorial Board

- Адаменко І.Н., професор, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Україна
- Антонов А.Н., д.ф.-м.н., професор, Інститут ядерних досліджень та ядерної енергії, Софія, Болгарія
- Баранник Є.А., д.ф.-м.н., професор, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Україна
- Береснев В.М., д.ф.-м.н., професор, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Україна
- Бережной Ю.А., д.ф.-м.н., професор, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Україна
- Бізоков А.А., д.ф.-м.н., професор, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Україна
- Брагіна Л.Л., д.ф.-м.н., професор, ДТУ «Харківський політехнічний інститут», Україна
- Брода Б., д.ф.-м.н., Лодзинський університет, Польща
- Драгович Б.Г., д.ф.-м.н., Белградський університет, Сербія
- Дуплій С.А., д.ф.-м.н., Центр інформаційних технологій (ZIV), Університет Мюнстера, Мюнстер, Німеччина
- Гаркуша І.Є., член-кореспондент НАН України, ННЦ Харківський фізико-технічний інститут, Україна
- Греков Д.Л., д.ф.-м.н., ННЦ Харківський фізико-технічний інститут, Україна
- Карнаухов І.М., академік НАН України, ННЦ Харківський фізико-технічний інститут, Україна
- Корчин А.Ю., член-кореспондент НАН України, ННЦ Харківський фізико-технічний інститут, Україна
- Лазурик В.Т., д.ф.-м.н., професор, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Україна
- Мельник В.Н., д.ф.-м.н., Інститут радіоастрономії, Харків, Україна
- Меренков Н.П., д.ф.-м.н., ННЦ Харківський фізико-технічний інститут, Україна
- Неклюдов І.М., академік НАН України, ННЦ Харківський фізико-технічний інститут, Україна
- Нотердам Ж.-М., доктор наук, Інститут фізики плазми Макса Планка, Гархінг, Німеччина
- Нурмагамбетов А.Ю., д.ф.-м.н., професор, ННЦ Харківський фізико-технічний інститут, Україна
- Остріков К.Н., д.ф.-м.н., Центр нанонауки плазми, Австралія, Клейтон, Австралія
- Пилипенко М.М., д.т.н. ННЦ Харківський фізико-технічний інститут, Україна
- Радінський І., д.ф.-м.н., Технічний університет Георга Асачі, Ясси, Румунія
- Слюсаренко Ю.В., академік НАН України, ННЦ Харківський фізико-технічний інститут, Україна
- Смоляков А.І., Саскачеванський університет, Саскатун, Канада
- Шульга Н.Ф., академік НАН України, ННЦ Харківський фізико-технічний інститут, Україна
- Ткаченко В.І., д.ф.-м.н., ННЦ Харківський фізико-технічний інститут, Україна

## Відповідальний секретар

Гірник С.А., к. ф.-м.н., Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків, Україна

## Редакція

Науково-навчальний інститут «ФТФ», Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

пр. Курчатова, 31, офіс 402, Харків, 61108, Україна

Тел: +38-057-335-18-33,

Електронна пошта: [eejr@karazin.ua](mailto:eejr@karazin.ua),

Веб-сторінка: <http://periodicals.karazin.ua/eejr> (система журналів з відкритим доступом)

Свідоцтво про державну реєстрацію №20644-10464П від 21.02.2014р.

© Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, 2022

REVIEW

- Plasmon-Exciton Interaction in Perspective Hetero-Systems** 6  
Natalya Ogon, Tetyana Bulavinets, Iryna Yaremchuk, Rostyslav Lesyuk  
*Плазмон-екситонна взаємодія у перспективних гетеро-системах*  
Наталя Огонь, Тетяна Булавінець, Ірина Яремчук, Ростислав Лесюк

ORIGINAL ARTICLES

- A Bio-Thermal Convection in a Porous Medium Saturated by Nanofluid Containing Gyrotactic Microorganisms Under an External Magnetic Field** 23  
Michael I. Kopp, Volodymyr V. Yanovsky, Ulavathi S. Mahabaleshwar  
*Біотермальна конвекція в пористому середовищі, яке насичене нанорідиною та містить гіротактичні мікроорганізми, під зовнішнім магнітним полем*  
Михайло Й. Копп, Володимир В. Яновський, Улаваті С. Махабалешвар
- Analysis of  $\alpha$ -<sup>208</sup>Pb Elastic Scattering at a Wide Energies by the S-Matrix Model** 48  
Yuri A. Bereznoy, Gennadiy M. Onyshchenko, Pylyp E. Kuznietsov, Volodymyr V. Pilipenko, Ivan I. Yakymenko  
*Аналіз пружного розсіювання  $\alpha$ -<sup>208</sup>Pb у широкому діапазоні енергій за допомогою S-матричної моделі*  
Юрій О. Бережної, Геннадій М. Онищенко, Пилип Е. Кузнєцов, Володимир В. Пилипенко, Іван І. Якименко
- Study of the Nuclear Structure for Some Nuclei Using Self-Consistent RPA Calculations with Skyrme-Type Interaction** 57  
Noor M. Kareem, Ali A. Alzubadi  
*Дослідження ядерної структури деяких ядер за допомогою самоузгоджених розрахунків RPA із взаємодією типу Скірми*  
Нур М. Карім, Алі А. Алзубаді
- Exotic Structure of <sup>17</sup>Ne-<sup>17</sup>N and <sup>23</sup>Al-<sup>23</sup>Ne Mirror Nuclei** 72  
Ruqaya A. Mohammed, Wasan Z. Majeed  
*Екзотична структура дзеркальних ядер <sup>17</sup>Ne-<sup>17</sup>N та <sup>23</sup>Al-<sup>23</sup>Ne*  
Рукая А. Мохаммед, Васан З. Маджид
- Heavy-Light Meson Masses in the Framework of Trigonometric Rosen-Morse Potential Using the Generalized Fractional Derivative** 80  
Mohamed Abu-Shady, Etido P. Inyang  
*Маси важких і легких мезонів у рамках тригонометричного потенціалу Розена-Морзе з використанням узагальненої дробової похідної*  
Мохамед Абу-Шаді, Етідо П. Ін'янг
- Analytical Solutions to The Schrödinger Equation with Collective Potential Models: Application to Quantum Information Theory** 87  
Funmilayo Ayedun, Etido P. Inyang, Efiogbe A. Ibanga, Kolawole M. Lawal  
*Аналітичні рішення рівняння Шредінгера з моделями колективного потенціалу: застосування до квантової теорії інформації*  
Фунмілайо Аїедун, Етідо П. Ін'янг, Ефіонге А. Ібанга, Колаволе М. Лавал
- A Study of Photoneutron Reactions Using Statistical Analysis** 99  
Deniz Canbula, Bora Canbula  
*Дослідження фотонейтронних реакцій за допомогою статистичного аналізу*  
Деніз Канбула, Бора Канбула
- Effect of Electric Field Modulation on The Onset of Electroconvection in a Couple Stress Fluid** 104  
Chandrappa Rudresha, Chandrashekar Balaji, Venkatesh Vidya Shree, Sokalingam Maruthamanikandan  
*Вплив модуляції електричного поля на початок електроконвекції в парній напруженій рідині*  
Чандраппа Рудреша, Чандрашекар Баладжі, Венкатеш Відья Шрі, Сокалінгам Марутаманікандан
- Effect of Magnetic Field Dependent Viscosity on Darcy-Brinkman Ferroconvection with Second Sound** 112  
Venkatesh Vidya Shree, Chandrappa Rudresha, Chandrashekar Balaji, Sokalingam Maruthamanikandan  
*Вплив залежної від магнітного поля в'язкості на фероконвекцію Дарсі-Брінкмана з другим звуком*  
Венкатеш Відья Шрі, Чандраппа Рудреша, Чандрашекар Баладжі, Сокалінгам Марутаманікандан
- Effect of Silver Nanoparticles Silar Cycle on TiO<sub>2</sub> Nanoparticles Thin Film: Optical and Structural Study** 118  
Daniel Thomas, Eli Danladi, Mary T. Ekwu, Philibus M. Gyuk, Muhammed O. Abdulmalik, Innocent O. Echi  
*Вплив сільярного циклу наночастинок срібла на тонку плівку наночастинок TiO<sub>2</sub>: оптичне та структурне дослідження*  
Деніел Томас, Елі Данладі, Мері Т. Екву, Філібус М. Гюк, Мухаммед О. Абдулмалік, Інокентій О. Ечі
- Numerical Study of 25.459% Alloyed Inorganic Lead-Free Perovskite CsSnGeI<sub>3</sub>-Based Solar Cell by Device Simulation** 125  
Muhammed O. Abdulmalik, Eli Danladi, Rita C. Obasi, Philibus M. Gyuk, Francis U. Salifu, Suleiman Magaji, Anselm C. Egbugha, Daniel Thomas  
*Чисельне дослідження сонячної батареї на основі 25,459% легованого неорганічного перовскіту, що не містить CsSnGeI<sub>3</sub>, шляхом моделювання пристрою*  
Мухаммед О. Абдулмалік, Елі Данладі, Ріта С. Обасі, Філібус М. Гюк, Френсіс У. Саліфу, Сулейман Магаджі, Анселем С. Егбуга, Даніель Томас
- Assessment of Explicit Models Based on the Lambert W-Function for Modeling and Simulation of Different Dye-Sensitized Solar Cells (DSSCs)** 136  
Jamu Benson Yerima, Dunama William, Alkali Babangida, Sabastine Chinedu Ezike  
*Оцінювання явних моделей на основі W-функції Ламберта для моделювання та відтворення різних сенсбілізованих барвниками сонячних елементів (DSSC)*  
Джаму Б. Єріма, Дунама Вільям, Алкалі Бабангіда, Сабастін С. Езіке

# East European Journal of Physics

No 4. 2022

<b>Study of CIGS Pseudo-Homojunction Thin Film Solar Cell Using SCAPS-1D</b> Samah Boudour, Idris Bouchama, Samiha Laidoudi, Walid Bedjaoui, Leila Lamiri, Ouafia Belgherbi, Siham Aziez <i>Дослідження псевдогомопереходу CIGS тонкоплівкового сонячного елемента з використанням SCAPS-1D</i> <i>Самах Будур, Ідріс Бучама, Саміха Лайдуді, Валід Беджауї, Лейла Ламірі, Уафія Белгербі, Сіхам Азіз</i>	145
<b>Sensitivity and Evanescent Field Study of a Uniaxial Anisotropic Planar Waveguide Based Optical Sensor</b> Abdelbaki Cherouana, Idris Bouchama, Abdelhalim Bencheikh, Samah Boudour, Muhammad Saeed Akhtar <i>Дослідження чутливості та еванесцентного поля оптичного сенсора на основі одноосного анізотропного плоского хвилеводу</i> <i>Абдельбакі Черуана, Ідріс Бушама, Абдельхалім Бенчейх, Сама Будур, Мухаммад Саїд Ахтар</i>	153
<b>An ab Initio Analysis of Structural, Optical, Electronic, and Thermal Properties of Cubic SrSnO<sub>3</sub> Using WEIN2k</b> Arya, Aditya Kumar, Varsha Yadav, Hari Pratap Bhaskar, Sushil Kumar, Satyam Kumar, Upendra Kumar <i>Ab initio аналіз структурних, оптичних, електронних, та термічних властивостей кубічного SrSnO<sub>3</sub> за допомогою WEIN2k</i> <i>Арья, Адітья Кумар, Варша Ядав, Харі Пратап Бхаскар, Сушіл Кумар, Сатьям Кумар, Упендра Кумар</i>	164
<b>Utilising Spectroscopy and Optical Microscopy to Characterize Titanium Dioxide Thin Films</b> Hmoud Al-Dmour <i>Використання спектроскопії та оптичної мікроскопії для характеристики тонких плівок діоксиду титану</i> <i>Хмуд Аль-Дмур</i>	171
<b>Enhancement of Structural and Optical Properties of CMC/PAA Blend by Addition of Zirconium Carbide Nanoparticles for Optics and Photonics Applications</b> Majeed Ali Habeeb, Zainab Sabry Jaber <i>Поліпшення структурних та оптичних властивостей суміші CMC/PAA шляхом додавання наночастинок карбиду цирконію для оптики та фотоніки</i> <i>Маджід Алі Хабіб, Зейнаб Сабрі Джабер</i>	176
<b>Preparation and Characterization of Cu<sub>2</sub>CrSnS<sub>4</sub> Thin Films Deposited at Different Temperatures</b> Huda Talib, Nabeel A. Bakr, Mohammed A. Abed <i>Отримання та характеристика тонких плівок Cu<sub>2</sub>CrSnS<sub>4</sub>, нанесених при різних температурах</i> <i>Худа Таліб, Набіл А. Бакр, Мохаммед А. Абед</i>	183
<b>Effect of Solvent Polarity on The Absorption and Fluorescence Spectra of Nicotinamide: Determination of Ground and Excited State Dipole Moments</b> Ataklti Abraha Gebreyohanes, Abebe Belay, Getachew Alemu <i>Вплив полярності розчинника на спектри поглинання та флуоресценції нікотинаміду: визначення дипольних моментів основного та збудженого станів</i> <i>Атакльті Абраха Гебрейоханес, Абебе Белай, Гетачеу Алему</i>	190
<b>Relativistic Symmetries of Bosonic Particles and Antiparticles in the Background of the Position-Dependent Mass for the Improved Deformed Hulthen Plus Deformed Type-Hyperbolic Potential in 3D-EQM Symmetries</b> Abdelmadjid Maireche <i>Релятивістські симетрії бозонних частинок і античастинок на фоні позиційно-залежної маси для вдосконаленого деформованого Хюльтен плюс покращеного потенціалу гіперболічного типу у симетриях 3D-EQM</i> <i>Абдельмаджид Майреш</i>	200
<b>Detection of Lysozyme Amyloid Fibrils Using Trimethine Cyanine Dyes: Spectroscopic and Molecular Docking Studies</b> Olga Zhytniakivska, Uliana Tarabara, Atanas Kurutos, Kateryna Vus, Valeriya Trusova, Galyna Gorbenko <i>Детектування амлоїдних фібрил лізоциму за допомогою триметинціанінових барвників: спектроскопічні дослідження та молекулярний докінг</i> <i>Ольга Житняківська, Уляна Тарабара, Атанас Курутос, Катерина Вус, Валерія Трусова, Галина Горбенко</i>	213
SIMULATION OF PHYSICAL PHENOMENA	
<b>A Demonstration Bench for Representing the Character of Phase Transitions of the First and Second Kind</b> Ivan V. Gushchin <i>Демонстраційний стенд для представлення характеру фазових переходів першого і другого роду</i> <i>Іван В. Гушчин</i>	222

**ПЛАЗМОН-ЕКСИТОННА ВЗАЄМОДІЯ У ПЕРСПЕКТИВНИХ ГЕТЕРО-СИСТЕМАХ<sup>†</sup>****Наталя Огонь<sup>a</sup>, Тетяна Булавинець<sup>a</sup>, Ірина Яремчук<sup>a</sup>, Ростислав Лесюк<sup>a,b,c,\*</sup>**<sup>a</sup>Національний університет «Львівська політехніка», кафедра електронної інженерії  
пл. Св. Юра 1, Львів, Україна<sup>b</sup>Університет Росток, Інститут фізики, вул. А. Айніштайна 23, Росток, ФРН<sup>c</sup>Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України, м. Львів, вул. Наукова 3б\*Corresponding Author: [rostyslav.lesyuk@uni-rostock.de](mailto:rostyslav.lesyuk@uni-rostock.de)

Received October 13, 2022; revised November 15, 2022; accepted November 25, 2022

Поверхневі плазмони та екситони широко досліджені експериментально та теоретично для різних систем матеріалів, однак низка аспектів потребує подальшого глибшого вивчення та розуміння, серед яких зв'язок названих квазі-частинок посідає важливе місце. Нові фізичні ефекти виникають, коли плазмони та екситони у наноструктурах починають локалізуватися на певних малих віддальях, внаслідок чого можна говорити про їхнє зв'язування. Складні системи, що містять збудження плазмонів та екситонів, а також їх взаємний зв'язок, демонструють цікаві оптичні властивості, які окремо вони проявляти не можуть. У такому типі взаємодії плазмон підсилює зв'язок між системою та зовнішнім полем, а екситон контролює певні спектральні властивості, що відкриває нові можливості керування їхнім оптичним відгуком. Коли резонансна частота локалізованого плазмона дуже близька до частоти молекулярного енергетичного переходу, важливим фактором, що впливає на їхню взаємодію, стає обмінна енергія між плазмонами та екситонами. В залежності від співвідношення між силою зв'язку та втратами енергії окремими складниками в системі, може виникати два типи зв'язку – сильний та слабкий. На додаток до взаємного зв'язку між плазмоном і екситоном, їхня різна ширина ліній і здатність з'єднуватися із зовнішнім полем забезпечують різноманітні засоби для налаштування оптичних властивостей гібридних систем. Таким чином, це дозволяє точно керувати світлом у нанометровому масштабі, відкриваючи можливості для нових пристроїв електроніки та фотоніки. У даному огляді ми висвітлюємо особливості слабого та сильного режимів плазмон-екситонного зв'язку, сучасні тенденції та перспективи в дослідженні гетеро-систем напівпровідник-метал, метал-2D-матеріал, напівпровідник-молекула тощо. Гібридні наноструктури напівпровідник-метал відкривають захоплюючі можливості для дослідження квантових явищ, оптичних процесів, багаточастинкових взаємодій та впевнено прямують до застосування у нових приладах фотоніки.

**Ключові слова:** поверхневі плазмони, екситони, плазмон-екситонна взаємодія**PACS:** 73.20.Mf**1. ВСТУП**

Теоретичні та експериментальні дослідження в області нанофотоніки у першу чергу пов'язані з розумінням оптично індукованих збуджень у нанорозмірних матеріалах та того, як властивості цих збуджень залежать від розміру, форми та середовища розташування наноструктур [1, 2]. Впродовж останнього десятиліття спостерігається інтенсивний ріст числа досліджень двох основних типів збудження: це плазмони у металевих наноструктурах [3] та екситони у молекулярних чи напівпровідникових структурах [4]. Плазмони – це колективні коливання вільних зарядів (зокрема електронів провідності в металах), і зв'язок світла з плазмонними резонансами в металевих наноструктурах привернув увагу насамперед через їхню здатність концентрувати оптичні поля до розмірів, значно менших за дифракційну межу [5]. Існує два види поверхневих плазмонів, які називають локалізованими поверхневими плазмонами (ЛПП) та поверхневі плазмони, що поширюються [6]. Локалізовані поверхневі плазмони – це у свою чергу коливання густини заряду, який локалізований на поверхні металевої частинки. Якщо розміри частинки є набагато меншими від довжини хвилі падаючого випромінювання, то зміщення електронів в металевій наночастинці призводить до утворення диполя, і відповідно сили, яка змушує електрони повернутися до стану рівноваги. Величина цієї сили є пропорційна до зміщення, що є необхідною умовою для гармонічного осцилятора, і тому можна говорити про власні частоти колективних коливань електронів в частинці. Отже, якщо частота коливань падаючого випромінювання співпадає з власною частотою вільних електронів, то виникає поверхневий плазмонний резонанс [7]. Такі плазмони в умовах резонансу призводять до значного підсилення локалізованого електромагнітного поля. Це у свою чергу дає змогу реалізувати механізми поверхнево-підсиленої спектроскопії (surface-enhanced spectroscopy) [8]. Поверхневі плазмони у поєднанні з фотонами можуть діяти як колективне збудження електронів провідності, які хвилеподібно поширюються вздовж межі між металом та діелектриком, тоді їх називають поверхневими плазмон-поляритонами [9]. Поверхневі плазмон-поляритони локалізуються поблизу межі розділу і можуть поширюватися вздовж поверхні металу до того часу, поки енергія не розсіється у вільний простір або з допомогою теплових втрат, або з допомогою випромінювання [10]. Поле застосувань плазмонних ефектів обмежується тим фактом, що час життя плазмонів становить лише 10–100 фс, після чого вони перетворюються або в світлову хвилю, або в коливання атомів. Одним з рішень даної проблеми може стати підсилення плазмонного сигналу за допомогою додавання фотонів, що випускаються в результаті контакту метал-напівпровідник. Світлові імпульси можуть

<sup>†</sup> Cite as: N. Ohon, T. Bulavinets, I. Yaremchuk, and R. Lesyuk, East Eur. J. Phys. 4, 6 (2022), (in Ukrainian). <https://doi.org/10.26565/2312-4334-2022-4-01>  
© N. Ohon, T. Bulavinets, I. Yaremchuk, R. Lesyuk, 2022

збуджувати електрони в напівпровіднику, створюючи екситони, що потім повертаються в початковий стан (рекомбінують) з випусканням фотонів. Екситони, у свою чергу, – це зв'язані електронно-діркові пари в молекулах або напівпровідниках. Екситони існують у напівпровідниках, ізоляторах та деяких рідинах, які можуть передавати енергію без перенесення електричного заряду [11, 12]. Екситони в напівпровідникових нанокристалах або квантових точках привернули особливу увагу через їхні частоти переходу, що залежать від розміру і можуть простягатися від ультрафіолету до інфрачервоної області спектру.[13]. Оптичні збудження в напівпровідникових наноструктурах визначаються електронними рівнями в зоні провідності та валентній зоні. В результаті квантового конфайнменту електронні рівні є дискретними в одному або декількох напрямках та можуть бути регульованими в залежності і від розміру, і від форми наночастинки [14, 15]. Основними оптичними збудженнями є переходи між цими дискретними рівнями в зонах провідності та валентності, що призводить до утворення зв'язаних електронно-діркових пар (екситонів). Рекомбінація екситону обмежується стабілізацією резонансу через перекриття хвильових функцій дірки та електрона, що призводить до збільшення часу життя екситону.

Нові фізичні ефекти можуть виникати, коли плазмони та екситони у наноструктурах починають локалізуватися на певних малих віддальх, внаслідок чого можна говорити про їхнє зв'язування. Складні системи, що містять збудження плазмонів та екситонів, а також їх взаємний зв'язок, проявляють цікаві оптичні властивості, які окремо вони проявляти не можуть. У нанорозмірному масштабі існує проблема невідповідності в розмірах між довжиною хвилі світла та енергією екситонів, що викликає слабку взаємодію між світлом і речовиною, перешкоджаючи високоефективному перетворенню енергії [16]. У той же час, плазмони можуть сильно зв'язуватися із зовнішнім полем та отримувати велике підсилення ближнього поля [17]. Такі підсилені локальні поля можуть сильно взаємодіяти з сусіднім екситонним матеріалом. Розташування екситонна поблизу поля плазмона суттєво впливає на оптичні властивості обох матеріалів [18]. Таким чином, комбінація плазмонів та екситонів відкриває нові можливості застосування метал-напівпровідникових структур [19, 20]. В таких гібридних системах плазмон стрімко підсилює зв'язок між системою і зовнішнім полем, а екситон у свою чергу дає можливість налаштувати оптичні властивості, що не можливо досягти застосовуючи ці компоненти поодиноці [21]. Отже, всебічне розуміння плазмон-екситонного зв'язку у перспективних гетеро-системах, таких як наприклад напівпровідник-метал, є необхідним для подальшого їх високоефективного практичного застосування. У даній роботі розглянуто особливості слабого та сильного режимів плазмон-екситонного зв'язку, сучасні тенденції та перспективи в дослідженні взаємодії металевих наночастинок з напівпровідниковими квантовими точками, металевих наночастинок із молекулами барвників та металевих наночастинок із 2D матеріалами.

## 2. ОСОБЛИВОСТІ СЛАБКОГО ТА СИЛЬНОГО РЕЖИМІВ ПЛАЗМОН-ЕКСИТОННОГО ЗВ'ЯЗКУ

Коли резонансна частота ЛПП дуже близька до частоти молекулярного енергетичного переходу, важливим фактором, що впливає на їхню взаємодію, стає обмінна енергія між ЛПП та екситонами. Залежно від того, чи є збурення між хвильовими функціями, тобто в залежності від співвідношення між силою зв'язку та втратами енергії окремими складниками в системі, може виникати два типи зв'язку – сильний та слабкий [22]. У режимі сильного екситон-плазмонного зв'язку моди ПП можуть когерентно гібридувати з молекулярними екситонами, і цей зв'язок придушує всі втрати і призводить до двох нових змішаних станів світла. Резонансна взаємодія між екситонами та плазмонами змінює хвильові функції екситона та відбувається зміна резонансної енергії екситона та ПП, яка є більшою за їхню природну ширину лінії. У цьому режимі енергія збудження ділиться між плазмонною та екситонною системами. Спостерігається так зване розщеплення Рабі. Явище розщеплення є результатом зворотного обміну енергією між двома осциляторами з частотою так званих осциляцій Рабі [23–25]. Таким чином, для сильного зв'язку частоти мають бути більшими, ніж ширина ліній. Варто зазначити, що у цьому режимі утворюється нова квазічастинка з особливими властивостями, яких не мала жодна вихідна частинка [26]. Сильний плазмон-екситонний зв'язок може бути застосований у сфері квантової інформації [27], для зміни порогу хімічних реакцій та контролю їх швидкості [28], в оптичних перемикачах [29], детекторах фотонів [30] тощо.

Взаємодію, за якої електромагнітні моди та хвильові функції плазмонів та екситонів не збурюються, називають слабким плазмон-екситонним зв'язком [31]. Загалом, у режимі слабого зв'язку добре проявляються такі явища, як підвищена швидкість випромінювання [32] (зменшення часу життя збуджених станів), збільшення перерізу поглинання та обмін енергією між екситоном та плазмоном [33]. Прикладом слабого зв'язку слугує ефект Парсела. Він полягає у збільшенні швидкості випромінювання осцилятором, що є в резонаторі, у порівнянні зі швидкістю випромінювання тим самим осцилятором у вільному просторі. Характеристикою цього ефекту є коефіцієнт Парсела, який показує, у скільки разів збільшується швидкість випромінювання в резонаторі [34].

Когерентну дипольну взаємодію між екситоном та електромагнітним полем можна описати квантово-оптичною моделлю Джейнса-Каммінгса як дворівневу систему, що взаємодіє з квантовим гармонічним осцилятором [35, 36]. В умовах резонансу динаміка ймовірності знаходження екситону ( $P_x$ ) у збудженому ( $e$ ) та основному ( $g$ ) станах визначається  $P_x^e(t) = \cos^2(\Omega_R \sqrt{n+1}t)$  та  $P_x^g(t) = \sin^2(\Omega_R \sqrt{n+1}t)$ , де  $n$  – число фотонів в режимі електромагнітного поля. Тут  $\Omega_R = \mu E$  це вакуумна частота Рабі, а  $\mu$  це екситонний дипольний момент,  $E$  відповідає напруженості вакуумного поля, що асоціюється із зв'язаною модою [37]. Система знаходиться в

режимі слабого зв'язку, якщо  $\Omega_R$  менша за ширину лінії окремої незв'язаної підсистеми або швидкості, з якою енергія передається неперервному середовищу (континууму). Якщо  $\Omega_R$  більша або співмірна із ширинами незв'язаних ліній, то екситони та моди електромагнітного поля сильно зв'язані. Особливості слабого та сильного режимів представлені в таблиці 1, адаптованій із роботи [37].

Для отримання систем із сильним зв'язком екситон-плазмонної взаємодії використовується низка плазмонних систем та екситонних квантових випромінювачів. В якості плазмонної системи характерним є використання благородних металів (золота та срібла), а також міді, оскільки вони володіють інтенсивними плазмонними резонансами у видимій області спектру та слабкими піками в УФ області [38-40]. З іншого боку, резонансні властивості екситонів також можна регулювати шляхом зміни розміру напівпровідникового матеріалу (наприклад у формі квантової точки, КТ) та густини молекул [41]. Очікувано сила екситон-плазмонного зв'язку може бути налаштована шляхом зміни відстані між двома матеріалами та поляризації збудження [42]. До прикладу, у роботі [42] розглядається система із сильним зв'язком екситон-плазмонної взаємодії «наночастинка золота–J-агрегат». Автори описують виникнення гібридних станів напівречовина-напівсвітло і називають їх плекситонами [43]. Таким чином, під плекситоном розуміють квазічастинку-носії плазмон-екситонного збудження.

**Таблиця 1.** Порівняння режимів слабого та сильного плазмон-екситонного зв'язку

Режим взаємодії	Умови	Зміни в резонансній позиції	Зміни в динаміці	Фізичний ефект та застосування
Слабкий зв'язок	$\Omega_R^2 \leq \frac{\gamma_x^2}{2} + \frac{\gamma^2}{2}$ $\gamma_x$ – ефективний зсув по фазі екситона; $\gamma$ – ефективний зсув по фазі мод поля.	- мале зміщення при резонансі  - гібридний стан не утворюється	Резонансне підсилення та нерезонансне затухання швидкості випромінювання	Ефект Парсела. Швидкі та ефективні джерела світла, направлене випромінювання, широкосмугова фотовольтаїка, покращене поверхневе раманівське розсіювання
Сильний зв'язок	$the \Omega_R^2 > \frac{\gamma_x^2}{2} + \frac{\gamma^2}{2}$	Істотний зсув. Утворення верхнього та нижнього поляритонів	Перенесення енергії між випромінювачем та резонатором  Керування загасанням коливачів випромінювача та резонатора	Осциляції Рабі. Швидкі та ефективні повністю оптичні пристрої, однофотонний транзистор, адаптація фізичних та хімічних властивостей, поляритонна генерація/конденсація

### 3. ВЗАЄМОДІЯ МЕТАЛЕВИХ НАНОЧАСТИНОК З НАПІВПРОВІДНИКОВИМИ КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ

Дослідження щодо плазмонно-екситонної взаємодії можна простежити з 70-х – початку 80-х років минулого століття, коли вперше було продемонстровано, що металеві плівки та металеві частинки можуть підсилювати оптичне поглинання та випромінювання у сусідніх молекулах барвника [31, 44]. Дослідження плазмон-екситонного зв'язку прискорилися під час загального відродження плазмоніки наприкінці 1990-х років, оскільки покращені методи виготовлення та визначення характеристик дозволили систематично вивчати та оптимізувати зв'язані структури метал-молекула та метал-напівпровідник [45]. Для спостереження та вивчення зв'язку між плазмонами та екситонами використовувалася плоска металева поверхня з одного боку та молекула або шар напівпровідника з іншого [46, 47]. Завдяки удосконаленню технологій виготовлення виробництва металевих наноструктур з індивідуальними розмірами, формою та хімічним складом в даний час є можливість виготовляти матеріали, які підтримують локалізовані плаزمони, – це різноманітні наностержні, наносфери, нанооболонки, нанопризми тощо. У той же час ведуться дослідження екситонних систем різної природи – молекул барвників, напівпровідникових квантових точок (КТ), квантових ям тощо. Спектр поглинання напівпровідникових КТ знаходиться у широкому діапазоні, тому його можна легко перекрити спектром плазмонів різних розмірів та різних систем матеріалів. Спектри випромінювання, навпаки, є вузькими і добре відділеними від спектру поглинання на величину так званого Стоксового зсуву. Фактично, спектри випромінювання є вузькими, ніж плазмонні смуги і тому, обираючи КТ різних розмірів, можна налаштовувати випромінювання екситона через плазмонний резонанс [48, 49].

Існує ряд як експериментальних, так і теоретичних досліджень, які показують існування сильного зв'язку між локалізованою парою електрон-дірка в напівпровідникових КТ і локалізованим поверхневим плазмоном в металевих наночастинках, що призводить до резонансної передачі енергії між ними [50, 51]. Така резонансна передача енергії є електродинамічним явищем, коли два осцилюючих диполі взаємодіють один з одним і за



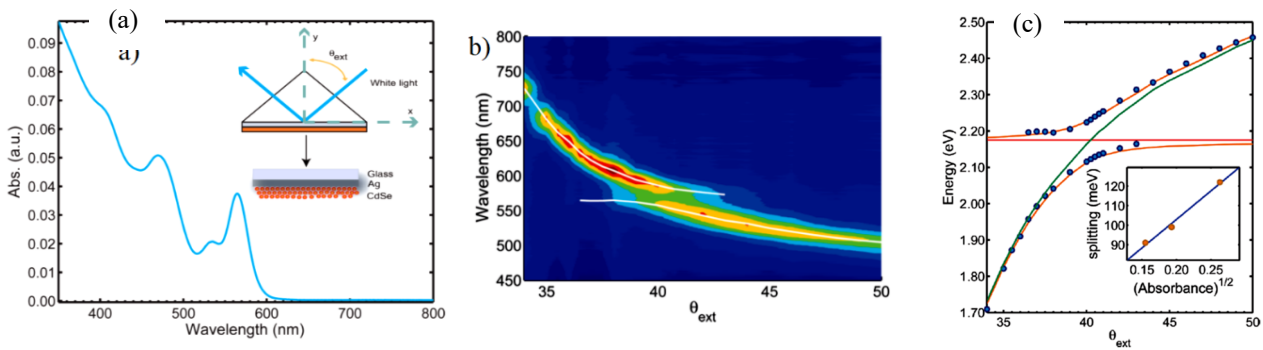
допомогою якого енергія передається безвипромінювально від донора у збудженому стані до акцептора в основному стані [52]. Найбільш ефективна передача енергії відбувається коли існує значне перекриття спектру випромінювання донора і спектру поглинання акцептора, а відстань між ними становить менше 10 нм. Зокрема у роботі [53] автори розглядають рекомбінацію електронно-діркової пари в КТ SiC і колективне коливання вільних електронів у НЧ Ag як осцилюючі диполі у першому наближенні з класичної точки зору. Відомо, що резонансна передача енергії між КТ SiC і НЧ Ag відбуватиметься в тому випадку, якщо їх екситон-плазмонний зв'язок досить сильний. Швидкість передачі енергії між квантовою точкою (донор) і наночастинкою (акцептор)  $R_{DA}$ , що знаходяться на відстані  $r$  буде рівна:

$$R_{DA} = \frac{3}{64\pi^5 r^6 \tau_{spD}} \int_0^\infty \left(\frac{c}{nv}\right)^4 g_D(\nu) \sigma_A(\nu) d\nu \quad (1)$$

де  $\tau_{spD}$  – час життя спонтанного випромінювання донора,  $n$  – показник заломлення навколишнього середовища,  $g_D(\nu)$  та  $\sigma_A(\nu)$  – функція форми лінії донора та переріз поглинання акцептора відповідно [54].

Коли КТ та плазмонні НЧ знаходяться в безпосередній близькості, енергетичний обмін між ними може сильно впливати на поведінку поглинання та випромінювання такої гібридної структури, порівняно із поведінкою двох компонентів окремо. Інтенсивність зв'язку між двома частинками буде сильно залежати від будови гібридної структури. В результаті виникає слабкий чи сильний зв'язок. Поява різної поведінки зв'язку може контролюватися комбінаціями КТ і плазмонних НЧ, а також просторовим розташуванням окремих компонентів [55]. Отримати оптимальне підсилення випромінювання можна ретельно налаштувавши ряд умов, зокрема зміну складу або структури плазмонної наночастинки, відстані та просторового розташування між КТ та НЧ, а також довжини хвилі збудження. Серед усіх факторів перекриття спектрів є першим параметром, який слід враховувати, оскільки він забезпечує достатню передачу енергії між плазмоном та екситоном.

Автори [56] досліджували сильний зв'язок між поверхневими плазмонами на тонких срібних плівках та найнижчим збудженим станом у КТ CdSe. КТ CdSe розподілялись по срібній плівці товщиною  $\approx 53$  нм, яка наносилась на скло. На рис. 1а показаний їх спектр поглинання на склі, а на рис. 1б – спектр відбивання. На вкладці рис. 1а видно, як  $p$ -поляризоване світло падає на скляну призму, до якої прикріплені наночастинки Ag та КТ CdSe на скляній підкладці. ПП збуджувалися в системі лише тоді, коли проекція хвильового вектора  $k_x$  падаючих фотонів збігалася з проекціями поверхневих поляритонів на межі розділу Ag/CdSe. Величина  $k_x$  визначалася за формулою  $(2\pi/\lambda)n_p \sin(\theta_{int})$ , де  $\lambda$  – довжина хвилі світла у вакуумі,  $n_p$  – показник заломлення матеріалу призми,  $\theta_{int}$  – кут падіння, вимірюваний біля основи призми. Оскільки  $k_x$  залежить як від довжини хвилі, так і від кута падіння світла, умова резонансу для збудження ПП може бути досягнута на різних довжинах хвилі, зміною кута падіння, забезпечуючи інструмент для дослідження плазмон-екситонної взаємодії шляхом введення збудження ПП в резонанс та виведення з нього.



**Рисунок 1.** (а) Спектр поглинання плівки CdSe товщиною приблизно 25 нм, нанесеної на скло (товщина вимірювалася поверхневим профілометром). З положення першого екситонного переходу оцінений діаметр КТ ( $\sim 3,4$  нм). На вкладці показана схема ATR експерименту<sup>1</sup>. (б) Спектр відбивання ( $R_p$ ) як функція кута падіння пучка білого світла на призму ( $\theta_{ext}$ ). Білі лінії – це позиції мінімумів відбивання (чітко видно розрив кривої при кутах в околі  $\theta_{ext} \sim 40^\circ$  та довжині хвилі  $\sim 570$  нм). (с) Експериментальні дисперсійні криві. Точки відповідають мінімумам відбивання  $p$ -поляризованого білого світла, вимірюного під кутами 38, 40, 40,5, 41 і  $45^\circ$  [56]. Горизонтальна лінія – енергія екситону КТ. Зелена крива відповідає енергії незв'язаних плазмонів, а помаранчева крива описує поляритонні гілки із розщепленням Рабі рівним 112 меВ. Адаптовано з [56]. *Передруковано з дозволу American Chemical Society (ACS).*

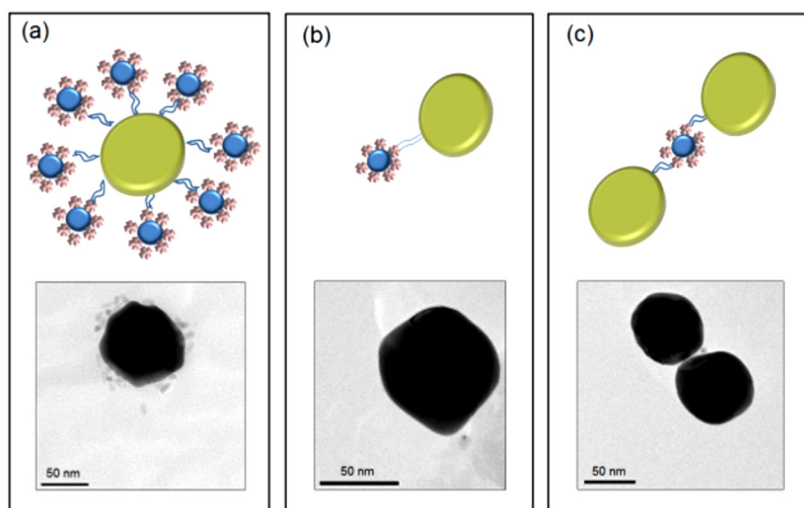
Для розрахунку оптичних властивостей Ag/CdSe автори [56] спочатку розробили модель із шарів скла, срібла, CdSe в середовищі повітря. Оскільки досліджувався лише екситонний перехід, то діелектрична проникність CdSe моделювалася за допомогою одного осцилятора Лоренца. Однак отримана за цією моделлю діелектрична проникність не відповідала КТ CdSe. Значення діелектричної проникності CdSe ( $\sim 6.8 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ ), яке узгоджується із раніше опублікованими даними [57] для об'ємного кристалу вдалося отримати,

<sup>1</sup> ATR – attenuated total reflectance – ослаблене повне внутрішнє відбивання

використавши модель Максвелла-Гарнетта [58]. Зв'язок екситонів в КТ з ПП відбувається через дипольну взаємодію, яка існує між електричним полем, створеним в CdSe сусідніми поверхневими плазмонами і електричним дипольним моментом екситонного переходу. Цю взаємодію найкраще можна описати, розглянувши систему з двох зв'язаних осциляторів [59]. Проведені розрахунки за цією моделлю дозволили визначити величину розщеплення Рабі, яке склало 112 меВ (рис.1с). Ця модель репродукує результат вимірювання енергетичного положення та спад оптичного відбивання як функцію кута падіння (тобто енергії фотонів), і свідчить про сильну взаємодію між полями плазмонів та екситонів. Бачимо, що величина розщеплення Рабі лінійно зростає із зростанням поглинання.

Автори [60] розглядали гнучку систему колоїдних НЧ, які можуть утворювати гібридні комбінації розташування на підкладці шляхом самоорганізації. Система дозволяла авторам налаштувати відстань між частинками та об'єднувати наночастинки різних розмірів і, таким чином, досліджувати екситон-плазмонний зв'язок методами оптичної спектроскопії та квантової оптики. Спостерігався слабкий режим зв'язку в рамках ефекту Парсела. КТ (CdSe) поміщалися у жорсткі полімерні оболонки, які можуть з'єднуватися з НЧ золота (Au) та утворюють гібридні частинки шляхом самоорганізації у водному розчині. Полімерна оболонка дозволяла контролювати відстань між частинками у нанометровій шкалі та регулювати ефект Парсела.

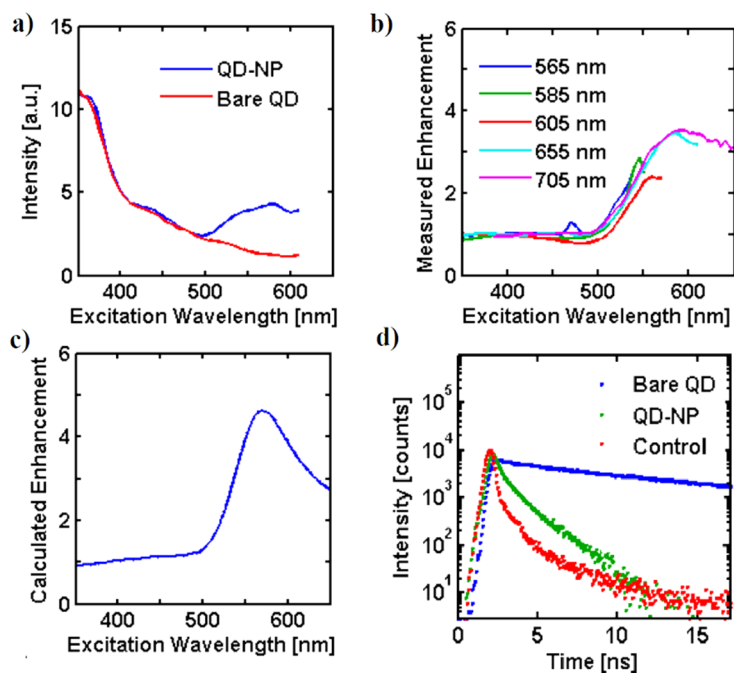
У подальшому були досліджені комплекси КТ-НЧ, які ґрунтуються на самоорганізації НЧ золота та КТ CdSe/ZnS (ядро/оболонка) [61], а віддалі КТ-НЧ золота у комплексах визначалась проміжною молекулою ДНК. Цей метод дає можливість формувати комплекси з відносно добрим контролем складу та структури, які можна використовувати для детального вивчення взаємодії КТ-НЧ золота. Автори [61] визначали плазмонний ефект на поглинання КТ та відділяли його від змін, викликаних випромінюванням. Виявлено, що при зміні кута падаючого світла поглинання КТ може стрімко змінюватися, майже на 2 порядки в структурах НЧ-КТ-НЧ, а це у свою чергу створює інструмент для керування випромінюванням цих об'єктів. Схематична структура досліджуваних комплексів КТ-НЧ представлена на рис.2



**Рисунок 2.** Комплекс КТ-НЧ. КТ (блакитні сфери) оточені молекулами стрептаведину та зв'язані проміжними молекулами біотин-ДНК-тіолу з НЧ золота розміром 80 нм (жовта сфера). (а) Багато КТ прикріплених до однієї НЧ золота (б) одна КТ прикріплена до однієї НЧ золота та (с) одна КТ, що має два ДНК зв'язки між КТ золота (шкала 50 нм). *Передруковано з дозволу American Chemical Society (ACS) [61].*

Для зв'язку КТ та НЧ золота автори використовували молекули тіол-ДНК-біотину. Тіоловою групою молекула ковалентно зв'язувалася із поверхнею НЧ золота, а кінець біотину – із стрептаведином на КТ. Контролюючи співвідношення КТ до НЧ формувалися різні структури, в яких декілька КТ з'єднувалися з однією НЧ (рис. 2 а–с). Ключовим аспектом досліджень було те, що в якості методу визначення поглинання КТ автори використовували спектроскопію фотолюмінесценції при змінній довжині хвилі збудження. Цей метод дозволяв ізолювати спектр поглинання КТ від інших процесів, які відбуваються в розчині, в першу чергу від резонансного розсіювання. При порівнянні нормованих спектрів НЧ+КТ із спектрами окремих КТ (рис. 3а) встановлено [61], що у широкому спектральному діапазоні (350–480 нм) два спектри майже співпадають, а з наближенням енергії збудження до довжини хвилі плазмонного резонансу (560 нм) поступово розходяться.

Чітко видно підсилення поглинання КТ в плазмонному резонансі, в околі 560 нм. Щоб визначити коефіцієнт підсилення, спектр КТ-НЧ поділено на спектр чистої КТ (рис. 3б). Крім того, коефіцієнт підсилення локального поля як функцію довжини хвилі збудження для даної геометрії, усереднену при різній поляризації падаючого світла було розраховано методом граничних елементів [62] (рис. 3с). Варто зазначити, що розрахована залежність підсилення від довжини хвилі дуже добре узгоджується з експериментальними результатами [61]. На рис. 4д порівнюється час життя випромінювання чистих КТ та розчинів КТ-НЧ з піком випромінювання на 605 нм. Час життя чистих КТ становить 17 нс, а час життя розчинів КТ-НЧ значно менший.



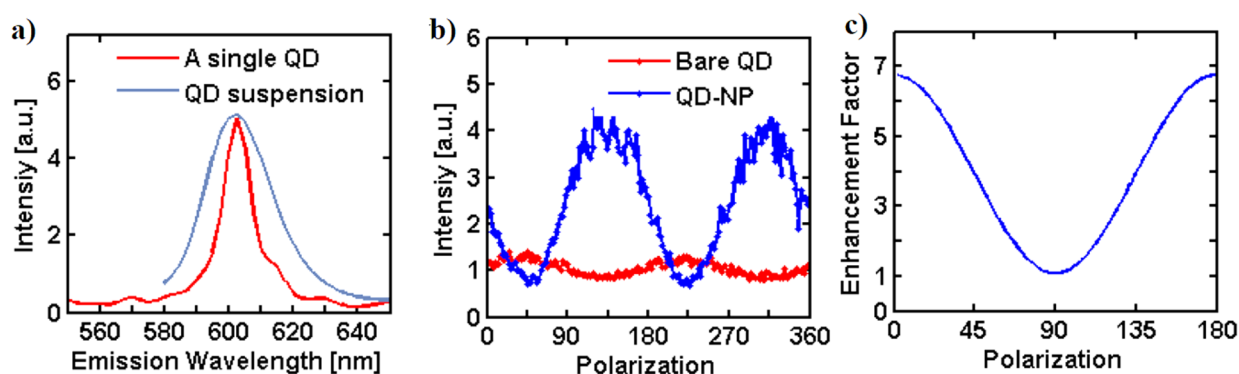
**Рисунок 3.** Збудження фотолюмінесценції та вимірювання часу життя водних розчинів, що містять комплекси з декількох КТ, прикріплених до одиночних НЧ золота. а) порівняння спектрів фотолюмінесценції структур КТ-НЧ та окремої КТ (інтенсивність фотолюмінесценції вимірювалась на довжині хвилі 655 нм). б) Спектри підсилення різних структур НЧ-НЧ, що випромінюють на довжинах хвиль 565, 585, 605, 655 та 705 нм (с) Розрахунковий спектр підсилення ближнього поля для структури КТ-НЧ (5 нм КТ, 80 нм НЧ, віддаль 10 нм). д) Час затухання КТ (синій) та гібридної структури (КТ-НЧ) (зелений), відгук вимірювальної системи – червоним. *Передруковано з дозволу American Chemical Society (ACS) [61]*

Також авторами [61] проведено дослідження чутливості фотолюмінесценції до поляризації падаючої хвилі. Для цього проводились вимірювання окремих об'єктів, що складаються з НЧ золота, прикріплених до одної КТ CdSe/ZnS (рис. 2b). Об'єкти наносилися на скло та занурювалися у воду, після чого опромінювалися лазером з довжиною хвилі 532 нм, сфокусованим у вузьку пляму (2 мкм). Інтенсивність світла вимірювалась за допомогою спектрометра. СЕМ зображення підтвердили, що середня віддаль між об'єктами є набагато більшою, ніж пляма збудження. На рис. 4а показаний типовий спектр випромінювання окремої КТ (червона лінія). Видно, що цей спектр є значно вузький, ніж спектр, отриманий при вимірюванні розчину (сіра лінія), що відображає дисперсію розмірів КТ в розчині.

Встановлено, що ансамбль КТ-НЧ має значно більш ширший розподіл інтенсивностей, а зміна інтенсивності випромінювання відбувається не через неоднорідність об'єктів, а через випадкову орієнтацію осі симетрії різних об'єктів КТ-НЧ відносно поляризації лазера. Слід відзначити, що при вимірюванні окремої КТ спостерігається слабка поляризаційна залежність, що пов'язується з асиметрією форми КТ [63, 64]. Синусоїдальна залежність об'єктів КТ-НЧ (рис. 4b) добре узгоджується з очікуваною плазмонною поведінкою: ближнє поле навколо металевої сфери є максимальним вздовж осі поляризації і мінімальним перпендикулярно до неї [65]. При обертанні поляризації лазера, максимуми та мінімуми переміщуються навколо НЧ, і тому змінюється локальне поле, що має КТ. Інтенсивність випромінювання КТ-НЧ у максимумі збільшується в порівнянні з окремими КТ, в той час як інтенсивність у мінімумі зменшується. Поляризаційна чутливість підсилюється у випадку НЧ-КТ-НЧ (рис. 2c). На рис. 4c показана розрахункова поляризаційна залежність коефіцієнта підсилення. Цей розрахунок визначає лише підсилення локального поля на КТ. Виміряна інтенсивність випромінювання є добутком цієї кривої підсилення та модифікованої квантової ефективності. Дослідження, проведені авторами [61], дають кількісне уявлення про різні механізми, що впливають на фотолюмінесценцію, таким чином показано внесок поляризаційного підсилення ближнього поля, зокрема для поглинання майже на 2 порядки, та внесок екситонної взаємодії із плазмонними модами, що змінює час життя екситону.

Привертає увагу велика кількість інших робіт, спрямованих на досягнення покращеного підсилення за рахунок перекриття випромінювання КТ зі спектрами локалізованих плазмонних резонансів наночастинок, а, отже, збільшення випромінювання або навіть комбінації збудження та випромінювання. У роботі [66] вивчалася динаміка загасання фотолюмінесценції КТ спектроскопією з часовим розділенням на масиві золотих дисків. Автори показали, що зв'язана система КТ-НЧ сильно розсіює в напрямку, який можна порівняти з напрямком і поляризацією збуджень поверхневих плазмонів. Отже, при орієнтації кута детектування в цьому напрямку швидкість загасання фотолюмінесценції збільшувалася. У роботі [67] вивчалися КТ CdSe/ZnS у контакті з періодичним масивом наночастинок срібла. Вони спостерігали збільшення швидкості спонтанного

випромінювання у 10 разів, що через конкуренцію з безвипромінювальними каналами випромінювання КТ призвело до збільшення інтенсивності флуоресценції до ~50 разів. Керування випромінюванням ансамблю КТ досягається шляхом зв'язування їх з різними металевими структурами, такими як плівки, наноструктуровані плівки, плазмонні антени, плазмонні кільця, метаматеріали, наноциліни та багато іншого [68].



**Рисунок 4.** Вимірювання індивідуальних об'єктів. (а) Порівняння спектру випромінювання окремої КТ та розчину. (б) Інтенсивність випромінювання окремої структури НЧ-КТ-НЧ як функції поляризації лазера. (с) Розрахункове підсилення ближнього поля для структури НЧ-КТ-НЧ (5 нм КТ, 80 нм НЧ, 10 нм відстань між ними) [61]. *Передруковано з дозволу American Chemical Society (ACS).*

Отже, синергетичний процес плазмон-екситонної взаємодії між КТ та металевими НЧ призводить до складного поєднання різних конкуруючих взаємодій. Завдяки цим взаємодіям відбувається кілька процесів. По-перше, плазмонне підсилення через металеві НЧ збільшує ефективний переріз поглинання та швидкість збудження квантового випромінювача (КТ). По-друге, швидкість загасання фотолюмінесценції КТ збільшується через ефект Парселла. І, нарешті, якщо КТ розташована в безпосередній близькості (відстань між частинками 50 нм) до плазмонних наноструктур, відкриваються додаткові резонансні канали передачі енергії, по яких відбувається передача енергії від КТ до НЧ металу.

#### 4. ВЗАЄМОДІЯ МЕТАЛЕВИХ НАНОСТРУКТУР ІЗ МОЛЕКУЛАМИ БАРВНИКІВ

Взаємодія плазмонів з екситонами у специфічних органо-неорганічних гібридних системах, в якій об'єднані наноструктуровані благородні метали та молекули, викликає значний інтерес і дослідницькі зусилля із сподіванням на реалізацію нових перспективних застосувань [69, 70]. Експериментальні та теоретичні дослідження продемонстрували різний ступінь сили взаємодії між металевими наночастинками та екситонами [71] у великих структурах [72, 73], а також одиночних наночастинках [74, 75]. Ці структури в переважній більшості виготовляються знову ж таки або зі срібла, або із золота. Їхнє використання означає, що підсилення поля поблизу поверхні металевих наночастинок легко перевищує один порядок у разі одиночних об'єктів та близько розташованих димерів, або може досягати кількох сотень на шорстких поверхнях [76].

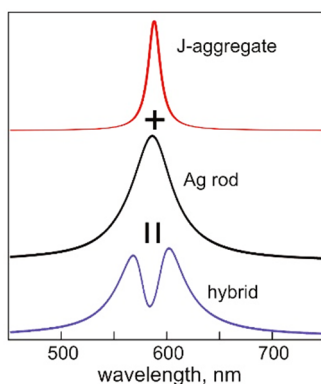
Декілька дослідних груп продемонстрували цікаві характеристики композиційних матеріалів метал/барвник. Для прикладу, сильний зв'язок між екситонами та поверхневими плазмонами в молекулах барвників зі срібними поверхнями спостерігав Rockrand зі співавторами, ще у 80-х роках минулого століття [77]. У таких системах срібні поверхні були вкриті моношаром масивів молекул барвників певної орієнтації, розташованих на певній відстані до срібної поверхні. Поверхневі плазмони збуджувалися через призму, а довжина хвилі, що відповідала частоті ПП, налаштовувалася кутом падіння світла. Сила зв'язку між ПП та екситонами керувалася зміною відстані між молекулами та металевим шаром. Шляхом відстеження резонансних піків дослідники вивчали дисперсійні криві ПП через коефіцієнт відбивання. У таких системах поодинокі металеві наночастинки можуть сильно взаємодіяти з тонкими шарами навколишніх молекул барвників, що призводить до сильно виражених спадів прозорості і утворення розщеплення піків на спектрах екстинкції. Такий процес добре пояснює рис.5 де показано взаємодію срібного наностержня із J-агрегатом.

Утворення цих двох піків узгоджується з розщепленням Рабі для вироджених плазмонних і екситонних енергетичних смуг. На рис.6 показано схему енергетичних станів, які виникають у результаті розщеплення Рабі, коли енергія плазмона і енергія екситона вироджені одна з одною, тобто у випадку, коли очікується максимальне перекриття спектрів.

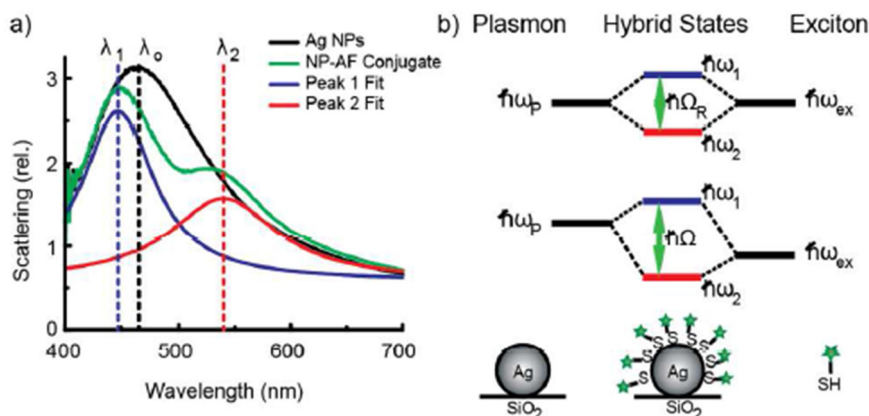
Енергія між двома гілками вважається енергією Рабі,  $\hbar\Omega_R$ . Після з'єднання плазмонний і екситонний стани гібридизуються, утворюючи два нових стани. Енергія верхнього і нижнього станів може бути розрахована за допомогою моделі зв'язаного гармонічного осцилятора:

$$E^{\omega_1, \omega_2}(\hbar\omega_p) = \frac{\hbar\omega_p + \hbar\omega_e}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\hbar\Omega_R)^2 + (\hbar\omega_p - \hbar\omega_e)^2} \quad (2)$$

де  $\hbar\omega_p$  і  $\hbar\omega_e$  – незв'язані енергії плазмонних і екситонних смуг відповідно, а  $\hbar\Omega_R$  – енергія Рабі, або енергія зв'язку, яка залежить від спектрального перекриття дипольного моменту екситонного переходу та індукованого поверхневого плазмонного електричного поля. Сильний зв'язок виникає, коли  $\hbar\Omega_R$  максимальне. У випадку, коли енергетичні стани не вироджені, енергія зв'язку між верхнім і нижнім станами буде рівною  $\hbar\Omega$  (як показано на Рис. 6).



**Рисунок 5.** Спектр поглинання вільного J-агрегату (червона крива) і спектр розсіяння наностержня Ag (чорна крива), які при взаємодії породжують гібридний плазмон-молекулярний спектр (фіолетова крива) [78]. *Передруковано з дозволу Springer Nature.*

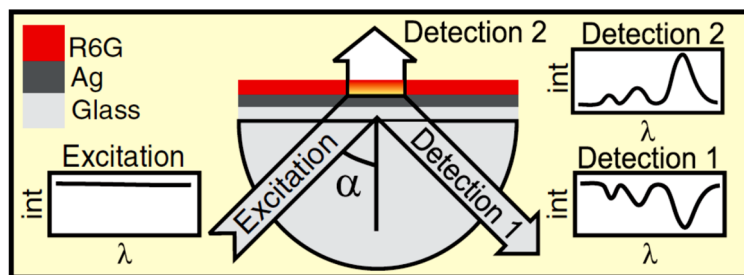


**Рисунок 6.** Спектри розсіяння НЧ срібла (чорна крива) та для композитів барвник/НЧ (зелена крива) (а). Спряжений спектр містить два піки ( $\lambda_1$  і  $\lambda_2$ ), що відповідають двом гібридизованим станам, створеним розщепленням Рабі. Схема розщеплення Рабі (b), коли енергія плазмона та екситона вироджена, створюються два гібридні стани з вищою та меншою енергіями від початкового стану [79]. *Передруковано з дозволу American Chemical Society (ACS).*

Wiederrecht зі співавторами вивчав надшвидку динаміку фотофізичних процесів та з'ясував, що композитні матеріали дозволяють ефективно керувати часом життя екситонів та змінювати процеси перерозподілу енергії [80]. Wurtz et al. продемонстрував, що поглинаюча здатність гібридного матеріалу може бути легко налаштована шляхом проектування просторової конфігурації металевої наноструктури та барвника [81]. Bellessa зі співавторами досліджував гібридну систему з концентрованими ціаніновими барвниками в полімерній матриці, нанесеній на срібну плівку [82]. Автори спостерігали дисперсію відбивання з відстанню між двома резонансними піками розміром 180 меВ, що набагато більше, ніж ширина ПП, а це вказує на сильний плазмон-екситонний зв'язок. Вони також спостерігали лінійну залежність розщеплення Рабі від величини квадратного кореня коефіцієнта поглинання шару барвника, що відповідало кількості екситонів, які брали участь у взаємодії.

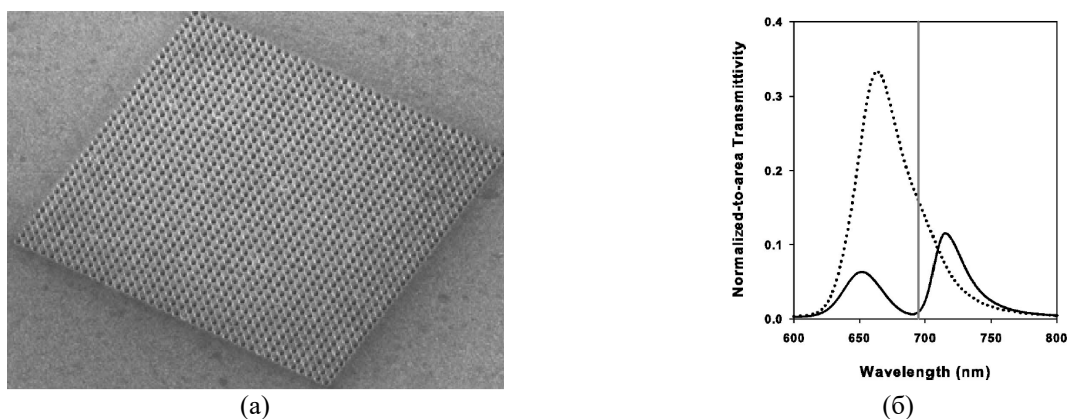
Автори [83] спостерігали подвійне вакуумне розщеплення Рабі за рахунок взаємодії між ПП із двома екситонними станами в молекулах R6G з енергією розщеплення 230 і 110 меВ. Експериментальна установка цієї моделі показана на рис. 7, де вкотре використана призматична конфігурація для налаштування довжини хвилі збудження.

Також для збудження ПП використовуються періодично структуровані металеві плівки, наприклад, у формі 2D-масиву дірок або наноцілин. Такі набори ґраток не потребують призми для збудження ПП, що спрощує процес вимірювання. Для прикладу, Dintinger et al. [84] виготовив для експерименту срібну металеву плівку з масивом отворів зі складчастою стрічковою конструкцією (рис. 8а), яка може забезпечувати більше однієї плазмонної резонансної моди для одного кута збудження, що відповідає певному імпульсу. Одна із таких резонансних плазмонних мод взаємодіє з екситоном в J-агрегатах, в результаті чого виникає значне розщеплення Рабі (250 меВ), рис. 8б [84].

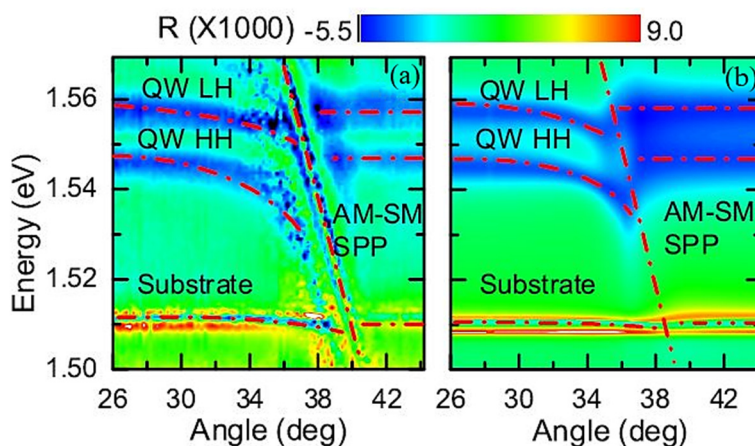


**Рисунок 7.** Схема вимірювання відбивання на срібній плівці із масивом органічних молекул R6G [83]. *Передруковано з дозволу American Physical Society.*

Vasa зі співавторами [85] вивчав когерентний зв'язок між ПП та екситонами квантових ям в гібридній структурі, що складалася з золотої наногратки, нанесеної на гетероструктуру квантової ями GaAs/AlGaAs. В такій системі дві моди ПП на межі розділу напівпровідник–метал та повітря–метал взаємодіють одна з одною, утворюючи нові симетричні та антисиметричні моди, які у свою чергу також взаємодіють одна з одною. Таким чином змішані симетричні-антисиметричні режими ПП поєднуються з екситонами як важких, так і легких дірок, продукуючи характерні спектри відбивання (рис. 9). Спектри демонструють зміщення резонансів важких та легких дірок квантової ями.



**Рисунок 8.** (а) Зображення типового масиву дірок, сформованих у срібній плівці, товщиною 370 нм, періодом 380 нм, діаметром 150 нм (скануючий електронний мікроскоп). (б) Спектр пропускання PVA, легованого J-агрегатами, на структурованому масиві срібла (суцільна лінія) та нелегованого PVA (штрихова лінія). Вертикальна пряма на відповідає енергії поглинання екситону і знаходиться в центрі розщеплення [84]. *Передруковано з дозволу American Physical Society.*



**Рисунок 9.** (а) Спектри відбивання гібридної структури у залежності від кута падіння збуджуючої хвилі. (б) Розрахункові спектри отримані із моделі зв'язаних осциляторів. Червоні штрих-пунктирні лінії відповідають дисперсії ПП та легих і важких дірок квантових ям [85]. *Передруковано з дозволу American Physical Society.*

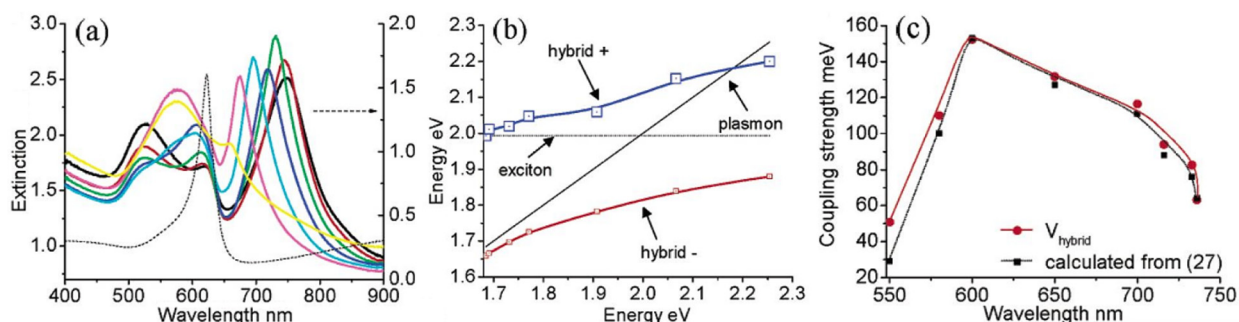
Існує низка досліджень, присвячених складним системам із екситонів та локалізованих поверхневих плазмонів в металевих наночастинках, таких як наностержні [86], наносфери [87], нанооболонки [88], нанокільця [89] тощо. Шляхом модифікації форми, плазмонної гібридизації та коригуванням складу матеріалу вдалось ефективно керувати енергією зв'язку між локалізованими поверхневими плазмонами (ЛПП) та

екситонами. Енергія локалізованого поверхневого плазмона залежить як від форми, так і від діелектричного середовища наноструктури. Наприклад, в наностержневій структурі енергія плазмона може бути налаштована на велике енергетичне вікно зміною співвідношення між радіусом та довжиною наностержня. Wurtz et al. [81] продемонстрував утворення плазмон-екситонних гібридних станів, досліджуючи масиви золотих наностержнів, оточених оболонкою з J-агрегатів. У цій системі силою зв'язку можна керувати, змінюючи товщину оболонки, створеної навколо стержнів, і отримувати розщеплення піків (рис. 10). Спектри екстинкції демонструють феномен розщеплення піків. Ефективна сила зв'язку теоретично виводиться з енергетичної діаграми. Ми спостерігаємо поведінку такої системи на рис. 11b, де енергія нерозщепленого ЛПП зміщується через нерезонансну високочастотну діелектричну проникність J-агрегатів. Як уже згадувалося, найсильніший плазмон-екситонний зв'язок отримується, коли резонанси екситону та плазмону перекриваються один з одним.

Також ефективним способом налаштувати енергію ЛПП є гібридизація стану. Zheng et al. [90] наводить дані про плазмон-екситонний зв'язок, яким можна динамічно керувати *in situ* в системах із масивами золотих нанодисків, покритих J-агрегатними молекулами. Змінюючи кут падіння вхідного світла з  $0^\circ$  до  $60^\circ$ , пік плазмонного резонансу можна зміщувати до нижчих енергій, і сила зв'язку стає слабшою. Плазмон, з'єднуючись із J-агрегатом, стає локалізованим, чия резонансна частота контролюється за допомогою гібридизації ЛПП. Відомо, що плазмонні структури ядро-оболонка мають два режими гібридизації, зумовлені сполученням між плазмонами. Гібридизація підтримується внутрішньою та зовнішньою поверхнями, які можуть бути налаштовані шляхом контролю співвідношення розмірів серцевини та товщини оболонки.

Melnikau et al. [91] продемонстрував, що когерентна взаємодія локалізованих плазмонів багатогранних наночастинок золота (нанозірок) та екситонів J-агрегатів призводить до розщеплення Рабі, що досягає 260 мЕВ. А за рахунок того, що нанозірки характеризуються поглинанням у видимому та ближньому інфрачервоному спектральному діапазоні авторам вдалося отримати подвійне розщеплення Рабі внаслідок одночасної когерентної взаємодії між плазмонами нанозірок та екситонами J-агрегатів двох різних ціанінових барвників.

Експериментальні та теоретичні роботи в цій галузі сприяють розробці новітніх гібридних систем та подальших досліджень взаємодії між декількома випромінювачами, опосередкованими локалізованими плазмонами різних металевих наноструктур, в тому числі в рамках квантової електродинаміки. Металеві наноструктури із молекулами барвників все частіше стають платформою для практичної розробки нанорозмірних оптоелектронних і квантових інформаційних пристроїв [92-94].



**Рисунок 10.** Спектри екстинкції гібридних золотих наностержнів (а при зміні сили зв'язку між плазмонною L-модою та екситонним переходом у молекулі. Дисперсійні криві ПП та екситона (b) та розщеплення гібридного стану. (c) Сила зв'язку, розрахована за допомогою моделі зв'язаних осциляторів [81]. *Передруковано з дозволу American Chemical Society (ACS).*

### 5. Взаємодія металевих наноструктур із 2D-матеріалами

2D-матеріали володіють новими цікавими електронними та оптичними властивостями у порівнянні із своїми макро-(3D)-аналогами [95]. В останнє десятиліття проводиться їхнє активне дослідження. Насамперед це – графен, а також халькогеніди перехідних металів. Однак через надмірну «тонкість» таких структур (атомарних моношарів) взаємодія світло-речовина в них є може бути слабкою, що обмежує їхнє застосування в оптоелектроніці. Металеві плазмонні наноструктури, як відомо, здатні утримувати світло у субхвильовій області, посилюючи взаємодію світло-речовина. Тому шляхом до підсилення цієї взаємодії може бути комбінація 2D матеріалів з інтегрованими плазмонними наноструктурами [96, 97]. Відкриття MoS<sub>2</sub> як прямозонного напівпровідника спонукало дослідників зосередитись на гетероструктурних 2D-напівпровідниках, які можуть продукувати міжшарові екситони з тривалим часом життя, з контрольованою енергією, поляризацією та просторовим розподілом [98-100]. Керувати властивостями таких матеріалів також можна шляхом інжекції носіїв з використанням 2D-металів.

У [101] представлено дослідження утворення плазмон-екситонних поляритонів у гібридних структурах на основі 2D дихалькогеніду перехідного металу (TMDC, WS<sub>2</sub>), що нанесений на металеву підкладку або металеву тонку плівку. Дослідження показали, що керування товщиною шару діелектрика або металевої плівки дозволяє налаштувати та стимулювати плазмон-екситонні взаємодії в межах «сильного зв'язку». Дисперсійне

співвідношення для поляритонів, що утворюються на межі розділу діелектрик/TMDC/метал, прямо впливає з неявної умови:

$$\frac{\epsilon_d}{K_d} + \frac{\epsilon_m}{K_m} = \frac{\sigma_{2D}}{i\omega\epsilon_0} \quad (3)$$

де  $K_d^2 = q^2 - \epsilon_d\omega^2/c^2$  та  $K_m^2 = q^2 - \epsilon_m\omega^2/c^2$ ;  $q$  – частота,  $\epsilon_d$  – відносна діелектрична проникність діелектрика, а  $\epsilon_m$  – комплексна діелектрична функція металу.

Електромагнітні властивості 2D TMDC враховуються через провідність матеріалу (поверхні)  $\sigma_{2D}$ , що визначається ефективною товщиною матеріалу. Чисельний розв'язок рівняння (3) дозволяє отримати поляритонний спектр у фазовому просторі ( $q, \hbar\omega$ ).

Комбінуючи графен і 2D-напівпровідники, та, використовуючи гексагональний бор-нітрид в якості 2D-ізолятора, можна створювати 2D-транзистори [102, 103]. На основі 2D-матеріалів останніми роками також ведуться розробки різного роду LED-пристроїв, лазерів, фотодетекторів тощо [104–108]. Детальний опис різних видів двовимірних плазмонних матеріалів, а також гібридних структур на їх основі наведено у роботі [109]. Варто зазначити, що відкриття графену привернуло увагу дослідників через ряд цікавих властивостей включаючи відносно посилену взаємодію світло–речовина [110–112], виняткову рухливість носіїв [113, 114] і можливість модифікувати електронні та оптичні властивості [115, 116]. Графен є плазмонним матеріалом у середньому та далекому інфрачервоному діапазоні, який забезпечує надзвичайний квантовий конфайнмент і має набагато менші втрати у порівнянні із благородними металами. Благородні метали, у свою чергу, покращують взаємодію світло-речовина в 2D-матеріалах за рахунок сильного утримання поля, що забезпечується плазмонними наноструктурами [97].

Завдяки особливій будові та зонній структурі 2D-матеріали дають змогу налаштовувати величину забороненої зони [117, 118] та отримувати сильні екситонні резонанси, однак один шар графену може поглинати лише 2,3% світла при нормальному падінні, що визначається виключно сталою тонкою структурою [119], а це створює суттєві проблеми та обмеження для багатьох електрооптичних та оптичних застосувань. Резонансна частота поверхневих плазмонів є чутливою до густини вільних електронів, якими можна керувати на межі розділу, тому є можливість створювати наноструктури цих металів налаштуванням плазмонів, що перетинають область видимого спектру.

Плазмони у тому ж графені фундаментально відрізняються від плазмонів у благородних металах [120–122]. Зонна структура графену містить два конуси Дірака, які з'єднуються в точці Дірака. Поблизу цієї точки закон дисперсії для електронів у графені має лінійний характер [123, 124]. В одній з перших робіт Fei et al. [125] досліджувалися плазмони у графені за допомогою скануючого оптичного мікроскопа ближнього поля розсіювального типу. Слід звернути увагу на те, що лінійний закон дисперсії при розгляданні гексагональної ґратки не є унікальною особливістю для даного типу кристалічної структури, а може описувати навіть кубічні ґратки. Плазмони у графені можна налаштовувати шляхом зміни енергії Фермі (внесенням домішки) або шляхом зміни геометрії (стиск, розтяг). Можливість налаштування властивостей плазмона у графені робить його придатним для багатьох застосувань починаючи від наноелектроніки та закінчуючи біологією. Середній ПЧ діапазон графенових плазмонів перетинається із діапазоном, що охоплює молекулярні коливання складних біомолекул, які можуть бути підсилені за допомогою графенового плазмонного резонансу [121]. Нещодавно графенові плазмони були теоретично запропоновані в якості платформи для квантових обчислень. Це двохкубітовий логічний елемент з кубітами, закодованими у графенових плазмонах. Цікаво, що ця технологія не потребує криогенного охолодження. В основі цієї концепції лежить взаємодія двох плазмонів [126].

В останні роки дослідниками ведеться активний пошук інших плазмонних матеріалів окрім широко відомих благородних металів та графену, як наприклад гетероперехід телурида вісмуту  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  та графену, в якому нанолісти демонструють декілька плазмонних мод, що охоплюють весь видимий діапазон спектру [127]. Ці моди у нанолістах внаслідок спінобитальної взаємодії можуть мати пік плазмонного резонансу, настроєний легуванням Se на довжину хвилі 400 нм. Крім того зв'язування  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  з графеном підсилює збудження плазмонів у графені.

Іншими цікавими матеріалами з плазмонними властивостями є двовимірні оксиди вольфраму та молібдену [128,129]. Завдяки своїй морфології вони можуть бути надлегкими матеріалами, а також мати велику діелектричну проникність. Слід відзначити, що плазмонний відгук можна регулювати, контролюючи кисневі вакансії у даних матеріалах (наприклад, просто опромінюючи матеріал сонячним світлом у присутності води). Іони водню впроваджуються у матеріал та викликають дефіцит кисню, різко змінюючи колір та збільшуючи інтенсивність плазмонно відгуку. Такий матеріал можна комбінувати з металевими НЧ для створення гібридної плазмонної наноструктури [130].

Коли плазмоніка увійшла у сферу 2D матеріалів із відкриттям плазмонів графену, були спроби також створити двохмірний електронний газ (2DEG) у комбінації з благородними металами. Maniyara et al. [131] розробив метод осадження з парів плівок золота товщиною менше 5 нм з використанням мідної затравки. Такі плівки є достатньо тонкими, щоб демонструвати ефекти, аналогічні тим, що є у двохмірних металевих матеріалах, таких як графен. Зміною конструкції масивів наноплівок золота можна зсувати плазмонний



резонанс з ближньої до середньої ІЧ області спектру. Також встановлено, що на плазмонні характеристики плівки впливає матеріал затравки.

Сильний плазмон-екситонний зв'язок теоретично був передбачений у роботі [132] на інтерфейсі 2D-халькогенідів перехідних металів з металом (зокрема,  $WS_2/Au$ ). Розраховане розщеплення Рабі становило 100 меВ при діелектричній проникності 2.1. Плазмонні матриці можуть демонструвати поверхневий гратковий резонанс, який проявляється у зменшенні ширини смуги плазмонного резонансу. Резонанс поверхневої гратки означає, що одна із хвиль, дифрагована граткою, поширюється у площині гратки. Такі матриці можуть використовуватися для зондування, кольорового друку без барвників. Також завдяки різким резонансам та відносно високій добротності вони є перспективними для вивчення поляритонних ефектів. Крім цього, сильний плазмон-екситонний зв'язок можна побачити на прикладі взаємодії 2D-матеріалів з плазмонною наноантоною. У таких структурах завдяки малому модовому об'єму плазмонних НЧ є можливість вивчати сильний зв'язок з малою кількістю екситонів. Високий переріз розсіювання таких НЧ дозволяє вивчати цю взаємодію за допомогою простих оптичних методів, таких як мікроскопія темного поля. У НЧ з моно- та тонкошаровим  $WSe_2$  на дзеркальній структурі (NPM) автори [133] спостерігали розщеплення Рабі у розмірі 135 меВ. Однією з великих переваг використання 2D напівпровідникових моношарів є можливість гнучкої зміни та налаштування їхніх властивостей. При прикладанні напруги на затворі транзистора змінюється показник заломлення в області екситонних резонансів. У випадку  $WSe_2$  зміна може досягати 60% для уявної частини та 20% для дійсної частини комплексного показника заломлення. Цей ефект пояснюється розширенням спектральної смуги екситонних міжзонних переходів. Можливість регулювання також застосовується для керування сильним зв'язком TMDs в резонаторах. Вбудовуючи моношар  $WS_2$  у резонатор, утворений двома срібними дзеркалами, тонкими шарами  $Al_2O_3$  та шаром ПММА, прикладанням напруги до затвору вдавалося керувати сильним зв'язком [134]. Також, вбудовавши шар  $MoS_2$  в структуру із золотих дзеркал, які виконують функцію затвору, кремнієвої підкладки та золотих наносмужок, авторам [135] вдалося електрично керувати випромінюванням екситон-плазмонних переходів. Останні роботи свідчать про появу надзвичайно перспективного напрямку досліджень комбінації 2D матеріалів із плазмонними наноструктурами для пристроїв високошвидкісного керування та сенсорики [136].

## ВИСНОВКИ

У даному огляді подано базові фізичні визначення поверхневих плазмонів та екситонів, окреслено їхні унікальні аспекти взаємодії зі світлом та показано зв'язок поверхневих плазмонів з екситонами з урахуванням особливостей слабого та сильного режимів їхнього зв'язку. Далі на основі літературних джерел останніх років наведено важливі роботи щодо взаємодії металевих наночастинок з напівпровідниковими квантовими точками, з молекулами барвників та 2D матеріалами. Попри значну кількість експериментальних робіт можна зробити висновок, що все ще необхідні подальші зусилля для кращого розуміння гібридних екситон/плазмонних наносистем. Зокрема частково відкритими залишаються такі питання, як наприклад, що регулює силу екситон-плазмонної взаємодії, як формуються нові шляхи рекомбінації в гібридних структурах і який зв'язок між структурою матеріалу та його відповідними характеристиками. Завдяки глибокому розумінню фундаментальних фізичних процесів у гібридних наноматеріалах метал/напівпровідник з'явиться можливість трансформувати низку областей науки та техніки, включаючи квантовий зв'язок, фотокаталіз та оптоелектронні пристрої в цілому. Проблеми проектування та виготовлення гібридних наноструктур, а також розуміння механізму екситон-плазмонної взаємодії можуть бути подолані спільними дослідницькими зусиллями у галузі синтезу, оптичної спектроскопії та теоретичного моделювання.

## ORCID IDs

✉ Tetiana Bulavinets, <https://orcid.org/0000-0001-6898-3363>; ✉ Iryna Yaremchuk, <https://orcid.org/0000-0002-7072-5950>

✉ Rostyslav Lesyuk, <https://orcid.org/0000-0001-8723-9222>

## REFERENCES

- [1] J.W. Haus, editor, *Fundamentals and applications of nanophotonics*, (Woodhead Publishing, 2016).
- [2] F. Xia, H. Wang, D. Xiao, M. Dubey, and A. Ramasubramaniam, "Two-dimensional material nanophotonics", *Nature Photonics*, **8**(12), 899-907 (2014). <https://doi.org/10.1038/nphoton.2014.271>
- [3] R.B. Schasfoort, editor, *Handbook of surface plasmon resonance*, (CPI Group Ltd., Royal Society of Chemistry, 2017).
- [4] G.D. Scholes, and G. Rumbles, Excitons in nanoscale systems, in: *Materials For Sustainable Energy: A Collection of Peer-Reviewed Research and Review Articles from Nature Publishing Group*, (Nature Publishing Group, UK, 2011), pp. 12-25.
- [5] M. Pelton, and G.W. Bryant, *Introduction to metal-nanoparticle plasmonics*, (John Wiley & Sons, 2013).
- [6] Y. Chu, and K.B. Crozier, "Experimental study of the interaction between localized and propagating surface plasmons", *Optics letters*, **34**(3), 244-246 (2009). <https://doi.org/10.1364/OL.34.000244>
- [7] S.A. Maier, *Plasmonics: fundamentals and applications*, Vol. 1, (Springer, New York, 2007), pp. 245.
- [8] C.L. Haynes, and R.P. Van Duyne, "Plasmon-sampled surface-enhanced Raman excitation spectroscopy", *The Journal of Physical Chemistry B*, **107**(30), 7426 (2003). <https://doi.org/10.1021/jp027749b>
- [9] J.M. Pitarke, V.M. Silkin, E.V. Chulkov, and P.M. Echenique, "Theory of surface plasmons and surface-plasmon polaritons", *Reports on progress in physics*, **70**(1), 1 (2006). <https://doi.org/10.1088/0034-4885/70/1/R01>

- [10] J.M. Brockman, B.P. Nelson, and R.M. Corn, "Surface plasmon resonance imaging measurements of ultrathin organic films", *Annual review of physical chemistry*, **51**(1), 41 (2000). <https://doi.org/10.1146/annurev.physchem.51.1.41>
- [11] E. Yablonoitch, "Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics", *Physical review letters*, **58**(20), 2059 (1987). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.2059>
- [12] H. Shi, and M.H. Du, "Discrete electronic bands in semiconductors and insulators: Potential high-light-yield scintillators", *Physical Review Applied*, **3**(5), 054005 (2015). <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.3.054005>
- [13] V.I. Klimov, editor, *Nanocrystal quantum dots*, (CRC press. 2017).
- [14] M.J. Kelly, *Low-dimensional semiconductors: materials, physics, technology, devices*, Vol. 3, (Clarendon Press, 1995).
- [15] A.P. Alivisatos, "Semiconductor clusters, nanocrystals, and quantum dots", *Science*, **271**(5251), 933-937 (1996). <https://www.science.org/doi/10.1126/science.271.5251.933>
- [16] M.A. Green, "Improved value for the silicon free exciton binding energy", *Aip Advances*, **3**(11), 112104 (2013). <https://doi.org/10.1063/1.4828730>
- [17] M. Li, S.K. Cushing, and N. Wu, "Plasmon-enhanced optical sensors: a review", *Analyst*, **140**(2), 386-406 (2015). <https://doi.org/10.1039/C4AN01079E>
- [18] E. Cao, W. Lin, M. Sun, W. Liang, and Y. Song, "Exciton-plasmon coupling interactions: from principle to applications", *Nanophotonics*, **7**(1), 145-167 (2018). <https://doi.org/10.1515/nanoph-2017-0059>
- [19] N. Kholmicheva, L.R. Romero, J. Cassidy, and M. Zamkov, "Prospects and applications of plasmon-exciton interactions in the near-field regime", *Nanophotonics*, **8**(4), 613-628 (2019). <https://doi.org/10.1515/nanoph-2018-0143>
- [20] D.E. Gxomez, K.C. Vernon, P. Mulvaney, and T.J. Davis, "Surface Plasmon Mediated Strong Exciton-Photon Coupling in Semiconductor Nanocrystals", *Nanoletters*, **10**(1), 274-278 (2010). <https://doi.org/10.1021/nl903455z>
- [21] X. Li, L. Zhou, Z. Hao, and Q.Q. Wang, "Plasmon-exciton coupling in complex systems", *Advanced Optical Materials*, **6**(18), 1800275 (2018). <https://doi.org/10.1002/adom.201800275>
- [22] Y. Sugawara, T.A. Kelf, J.J. Baumberg, M.E. Abdelsalam, and P.N. Bartlett "Strong coupling between localized plasmons and organic excitons in metal nanovoids", *Physical review letters*, **97**(26), 266808 (2006). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.266808>
- [23] S. Savasta, R. Saija, A. Ridolfo, O. Di Stefano, P. Denti, and F. Borghese, "Nanopolaritons: vacuum Rabi splitting with a single quantum dot in the center of a dimer nanoantenna", *ACS nano*, **4**(11), 6369-6376 (2010). <https://doi.org/10.1021/nn100585h>
- [24] R.D. Artuso, and G.W. Bryant, "Strongly coupled quantum dot-metal nanoparticle systems: Exciton-induced transparency, discontinuous response, and suppression as driven quantum oscillator effects", *Physical Review B*, **82**(19), 195419 (2010). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.195419>
- [25] G. Zengin, G. Johansson, P. Johansson, T. J. Antosiewicz, M. Käll, and T. Shegai, "Approaching the strong coupling limit in single plasmonic nanorods interacting with J-aggregates", *Scientific reports*, **3**(1), 1-8 (2013). <https://doi.org/10.1038/srep03074>
- [26] N.T. Fofang, T.H. Park, O. Neumann, N.A. Mirin, P. Nordlander, and N.J. Halas, "Plexcitonic nanoparticles: plasmon-exciton coupling in nanoshell-J-aggregate complexes", *Nano letters*, **8**(10), 3481-3487 (2008). <https://doi.org/10.1021/nl8024278>
- [27] K. Hennessy, A. Badolato, M. Winger, D. Gerace, M. Atatüre, S. Gulde, and A. Imamoglu, "Quantum nature of a strongly coupled single quantum dot-cavity system", *Nature*, **445**(7130), 896-899 (2007). <https://doi.org/10.1038/nature05586>
- [28] H. Wei, D. Ratchford, X. Li, H. Xu, and C.K. Shih, "Propagating surface plasmon induced photon emission from quantum dots", *Nano letters*, **9**(12), 4168-4171 (2009). <https://doi.org/10.1021/nl9023897>
- [29] E. Eizner, and T. Ellenbogen, "Ultrafast all-optical switching based on strong coupling between excitons and localized surface plasmons", In *CLEO: QELS Fundamental Science*, Optical Society of America, (FTh4B-6, 2016, June). [https://doi.org/10.1364/CLEO\\_QELS.2016.FTh4B.6](https://doi.org/10.1364/CLEO_QELS.2016.FTh4B.6)
- [30] J. McKeever, A. Boca, A.D. Boozer, J.R. Buck, and H.J. Kimble, "Experimental realization of a one-atom laser in the regime of strong coupling", *Nature*, **425**(6955), 268-271 (2003). <https://doi.org/10.1038/nature01974>
- [31] K.H. Drexhage, "IV interaction of light with monomolecular dye layers", In *Progress in optics*, Elsevier, **12**, 163-232 (1974). [https://doi.org/10.1016/S0079-6638\(08\)70266-X](https://doi.org/10.1016/S0079-6638(08)70266-X)
- [32] K.Y. Yang, K.C. Choi, and C.W. Ahn, "Surface plasmon-enhanced spontaneous emission rate in an organic light-emitting device structure: Cathode structure for plasmonic application", *Applied Physics Letters*, **94**(17), 121 (2009). <https://doi.org/10.1063/1.3125249>
- [33] S. Balci, E. Karademir, C. Kocabas, A. Aydinli, "Absorption enhancement of molecules in the weak plasmon-exciton coupling regime", *Optics Letters*, **39**(17), 4994-4997 (2014). <https://doi.org/10.1364/OL.39.004994>
- [34] D. Zhao, R.E. Silva, C. Climent, J. Feist, A.I. Fernández-Domínguez, and F.J. García-Vidal, "Impact of vibrational modes in the plasmonic Purcell effect of organic molecules", *ACS photonics*, **7**(12), 3369-3375 (2020). <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.0c01095>
- [35] P. Törmä, and W.L. Barnes, "Strong coupling between surface plasmon polaritons and emitters: a review", *Reports on Progress in Physics*, **78**(1), 013901 (2014). <https://doi.org/10.1088/0034-4885/78/1/013901>
- [36] P. Vasa, and C. Lienau, "Strong light-matter interaction in quantum emitter/metal hybrid nanostructures", *Acs Photonics*, **5**(1), 2-23 (2018). <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.7b00650>
- [37] P. Vasa, "Exciton-surface plasmon polariton interactions", *Advances in Physics: X*, **5**(1), 1749884 (2020). <https://doi.org/10.1080/23746149.2020.1749884>
- [38] W.A. Murray, and W.L. Barnes, "Plasmonic materials", *Advanced materials*, **19**(22), 3771-3782 (2007). <https://doi.org/10.1002/adma.200700678>
- [39] V. Fitio, I. Yaremchuk, O. Vernyhor, and Y. Bobitski, "Resonance of surface-localized plasmons in a system of periodically arranged gold and silver nanowires on a dielectric substrate". *Applied Nanoscience*, **8**(5), 1015-1024 (2018). <https://doi.org/10.1007/s13204-018-0686-z>
- [40] V. Fitio, I. Yaremchuk, O. Vernyhor, and Y. Bobitski, "Resonance of surface-localized plasmons in a system of periodically arranged copper and aluminum nanowires on a dielectric substrate", *Applied Nanoscience*, **10**(8), 2609-2616 (2020). <https://doi.org/10.1007/s13204-019-01065-7>

- [41] M.C. Beard, "Multiple exciton generation in semiconductor quantum dots", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **2**(11), 1282-1288 (2011). <https://doi.org/10.1021/jz200166y>
- [42] D. Zheng, S. Zhang, Q. Deng, M. Kang, P. Nordlander, and H. Xu, "Manipulating coherent plasmon–exciton interaction in a single silver nanorod on monolayer WSe<sub>2</sub>", *Nano letters*, **17**(6), 3809-3814 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b01176>
- [43] N.T. Fofang, T.H. Park, O. Neumann, N.A. Mirin, P. Nordlander, and N.J. Halas, "Plexcitonic nanoparticles: plasmon–exciton coupling in nanoshell–J-aggregate complexes", *Nano letters*, **8**(10), 3481-3487 (2008). <https://doi.org/10.1021/nl8024278>
- [44] A.M. Glass, P.F. Liao, J.G. Bergman, and D.H. Olson, "Interaction of metal particles with adsorbed dye molecules: absorption and luminescence", *Optics Letters*, **5**(9), 368-370 (1980). <https://doi.org/10.1364/OL.5.000368>
- [45] M. Pelton, M. Sheldon, and J. Khurgin, "Plasmon–exciton coupling", *Nanophotonics*, **8**(4), 513-516 (2019). <https://doi.org/10.1515/nanoph-2019-0065>
- [46] C. Bonnand, J. Bellessa, and J.C. Plenet, "Properties of surface plasmons strongly coupled to excitons in an organic semiconductor near a metallic surface", *Physical Review B*, **73**(24), 245330 (2006). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.245330>
- [47] J. Bellessa, C. Symonds, C. Meynaud, J.C. Plenet, E. Cambril, A. Miard, and A. Lemaître, "Exciton/plasmon polaritons in GaAs/Al<sub>0.93</sub>Ga<sub>0.07</sub>As heterostructures near a metallic layer", *Physical Review B*, **78**(20), 205326 (2008). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.205326>
- [48] A.G. Curto, G. Volpe, T.H. Taminiau, M.P. Kreuzer, R. Quidant, and N.F. van Hulst, "Unidirectional emission of a quantum dot coupled to a nanoantenna", *Science*, **329**(5994), 930-933 (2010). <https://www.science.org/doi/10.1126/science.1191922>
- [49] J. Lee, P. Hernandez, J. Lee, A. O. Govorov, and N.A. Kotov, "Exciton–plasmon interactions in molecular spring assemblies of nanowires and wavelength-based protein detection", *Nature materials*, **6**(4), 291-295 (2007). <https://doi.org/10.1038/nmat1869>
- [50] G.A. Jones, and D.S. Bradshaw, "Resonance energy transfer: from fundamental theory to recent applications", *Frontiers in Physics*, **7**, 100 (2019). <https://doi.org/10.3389/fphy.2019.00100>
- [51] M.C. Dos Santos, W.R. Algar, I.L. Medintz, and N. Hildebrandt, "Quantum dots for Förster resonance energy transfer (FRET)", *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, **125**, 115819 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.trac.2020.115819>
- [52] I.L. Medintz, and N. Hildebrandt, editors, *FRET-Forster Resonance Energy Transfer: From Theory to Applications*, (John Wiley & Sons, 2013).
- [53] X. Guo, Y. Zhang, B. Fan, and J. Fan, "Quantum confinement effect in 6H-SiC quantum dots observed via plasmon–exciton coupling-induced defect-luminescence quenching", *Applied Physics Letters*, **110**(12), 123104 (2017). <https://doi.org/10.1063/1.4978903>
- [54] O. Svelto, and D.C. Hanna, *Principles of lasers*, (New York: Plenum press, 1998).
- [55] Y. Luo, and J. Zhao, "Plasmon–exciton interaction in colloiddally fabricated metal nanoparticle–quantum emitter nanostructures", *Nano Research*, **12**(9), 2164-2171 (2019). <https://doi.org/10.1007/s12274-019-2390-z>
- [56] D.E. Gomez, K.C. Vernon, P. Mulvaney, and T.J. "Davis, Surface plasmon mediated strong exciton–photon coupling in semiconductor nanocrystals", *Nano letters*, **10**(1), 274-278 (2010). <https://doi.org/10.1021/nl903455z>
- [57] J. Jasieniak, L. Smith, J. Van Embden, P. Mulvaney, and M. Califano, "Re-examination of the size-dependent absorption properties of CdSe quantum dots", *The Journal of Physical Chemistry C*, **113**(45), 19468-19474 (2009). <https://doi.org/10.1021/jp906827m>
- [58] I. Pastoriza-Santos, D. Gomez, J. Perez-Juste, L. M. Liz-Marzán, and P. Mulvaney, "Optical properties of metal nanoparticle coated silica spheres: a simple effective medium approach", *Physical Chemistry Chemical Physics*, **6**(21), 5056-5060 (2004). <https://doi.org/10.1039/B405157B>
- [59] L.C. Andreani, G. Panzarini, and J.M. Gérard, "Strong-coupling regime for quantum boxes in pillar microcavities: Theory", *Physical Review B*, **60**(19), 13276 (1999). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.13276>
- [60] C. Strelow, T. S. Theuerholz, C. Schmidtke, M. Richter, J.P. Merkl, H. Kloust, and H. Lange, "Metal–semiconductor nanoparticle hybrids formed by self-organization: A platform to address exciton–plasmon coupling", *Nano Letters*, **16**(8), 4811-4818 (2016). <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b00982>
- [61] E. Cohen-Hoshen, G.W. Bryant, I. Pinkas, J. Sperling, and I. Bar-Joseph, "Exciton–plasmon interactions in quantum dot–gold nanoparticle structures", *Nano letters*, **12**(8), 4260-4264 (2012). <https://doi.org/10.1021/nl301917d>
- [62] J. Aizpurua, G.W. Bryant, L.J. Richter, F.G. De Abajo, B.K. Kelley, and T. Mallouk, "Optical properties of coupled metallic nanorods for field-enhanced spectroscopy", *Physical Review B*, **71**(23), 235420 (2005). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.235420>
- [63] B. Suo, X. Su, J. Wu, D. Chen, A. Wang, and Z. Guo, "Poly (vinyl alcohol) thin film filled with CdSe–ZnS quantum dots: Fabrication, characterization and optical properties", *Materials Chemistry and Physics*, **119**(1-2), 237-242 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2009.08.054>
- [64] S. Acharya, A.B. Panda, S. Efrima, and Y. Golan, "Polarization properties and switchable assembly of ultranarrow ZnSe nanorods", *Advanced Materials*, **19**(8), 1105-1108 (2007). <https://doi.org/10.1002/adma.200602057>
- [65] S. Foteinopoulou, J.P. Vigneron, and C. Vandenbem, "Optical near-field excitations on plasmonic nanoparticle-based structures", *Optics Express*, **15**(7), 4253-4267 (2007). <https://doi.org/10.1364/OE.15.004253>
- [66] Y. Wang, T. Yang, M.T. Tuominen, and M. Achermann, "Radiative rate enhancements in ensembles of hybrid metal–semiconductor nanostructures", *Physical review letters*, **102**(16), 163001 (2009). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.163001>
- [67] J.H. Song, T. Atay, S. Shi, H. Urabe, and A.V. Nurmikko, "Large enhancement of fluorescence efficiency from CdSe/ZnS quantum dots induced by resonant coupling to spatially controlled surface plasmons", *Nano letters*, **5**(8), 1557-1561 (2005). <https://ieeexplore.ieee.org/document/1548711>
- [68] O. Bitton, S.N. Gupta, and G. Haran, "Quantum dot plasmonics: from weak to strong coupling", *Nanophotonics*, **8**(4), 559-575 (2019). <https://doi.org/10.1515/nanoph-2018-0218>
- [69] J. McKeever, A. Boca, A.D. Boozer, J.R. Buck, and H.J. Kimble, "Experimental realization of a one-atom laser in the regime of strong coupling", *Nature*, **425**(6955), 268-271 (2003). <https://doi.org/10.1038/nature01974>

- [70] A.L. Rodarte, and A.R. Tao, “Plasmon–exciton coupling between metallic nanoparticles and dye monomers”, *The Journal of Physical Chemistry C*, **121**(6), 3496-3502 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b08905>
- [71] P. Törmä, and W.L. Barnes, “Strong coupling between surface plasmon polaritons and emitters: a review”, *Reports on Progress in Physics*, **78**(1), 013901 (2014). <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0034-4885/78/1/013901>
- [72] J. Dintinger, S. Klein, F. Bustos, W.L. Barnes, and T.W. Ebbesen, “Strong coupling between surface plasmon-polaritons and organic molecules in subwavelength hole arrays”, *Physical Review B*, **71**(3), 035424 (2005). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.035424>
- [73] J. Bellessa, C. Symonds, K. Vynck, A. Lemaitre, A. Brioude, L. Beaur, and P. Valvin, “Giant Rabi splitting between localized mixed plasmon-exciton states in a two-dimensional array of nanosize metallic disks in an organic semiconductor”, *Physical Review B*, **80**(3), 033303 (2009). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.033303>
- [74] G. Zengin, M. Wersäll, S. Nilsson, T. J. Antosiewicz, M. Käll, and T. Shegai, “Realizing strong light-matter interactions between single-nanoparticle plasmons and molecular excitons at ambient conditions”, *Physical review letters*, **114**(15), 157401 (2015). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.157401>
- [75] M. Wersäll, J. Cuadra, T. J. Antosiewicz, S. Balci, and T. Shegai, “Observation of mode splitting in photoluminescence of individual plasmonic nanoparticles strongly coupled to molecular excitons”, *Nano letters*, **17**(1), 551-558 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b04659>
- [76] Z.J. Yang, T.J. Antosiewicz, and T. Shegai, “Role of material loss and mode volume of plasmonic nanocavities for strong plasmon-exciton interactions”, *Optics express*, **24**(18), 20373-20381 (2016). <https://doi.org/10.1364/OE.24.020373>
- [77] I. Pockrand, A. Brillante, and D. Möbius, “Exciton–surface plasmon coupling: An experimental investigation”, *The Journal of chemical physics*, **77**(12), 6289-6295 (1982). <https://doi.org/10.1063/1.443834>
- [78] G. Zengin, G. Johansson, P. Johansson, T.J. Antosiewicz, M. Käll, and T. Shegai, “Approaching the strong coupling limit in single plasmonic nanorods interacting with J-aggregates”, *Scientific reports*, **3**(1), 1-8 (2013). <https://doi.org/10.1038/srep03074>
- [79] A.L. Rodarte, and A.R. Tao, “Plasmon–exciton coupling between metallic nanoparticles and dye monomers”, *The Journal of Physical Chemistry C*, **121**(6), 3496-3502 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b08905>
- [80] G.P. Wiederrecht, and G.A. Wurtz, J. Hranisavljevic, “Coherent coupling of molecular excitons to electronic polarizations of noble metal nanoparticles”, *Nano Letters*, **4**(11), 2121-2125 (2004). <https://doi.org/10.1021/nl0488228>
- [81] G.A. Wurtz, P.R. Evans, W. Hendren, R. Atkinson, W. Dickson, R.J. Pollard, and C. Bower, “Molecular plasmonics with tunable exciton–plasmon coupling strength in J-aggregate hybridized Au nanorod assemblies”, *Nano letters*, **7**(5), 1297-1303 (2007). <https://doi.org/10.1021/nl070284m>
- [82] J. Bellessa, C. Bonnand, J.C. Plenet, and J. Mugnier, “Strong coupling between surface plasmons and excitons in an organic semiconductor”, *Physical review letters*, **93**(3), 036404 (2004). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.036404>
- [83] T.K. Hakala, J.J. Toppari, A. Kuzyk, M. Pettersson, H. Tikkanen, H. Kunttu, and P. Törmä, “Vacuum Rabi splitting and strong-coupling dynamics for surface-plasmon polaritons and rhodamine 6G molecules”, *Physical Review Letters*, **103**(5), 053602 (2009). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.053602>
- [84] J. Dintinger, S. Klein, F. Bustos, W.L. Barnes, and T.W. Ebbesen, “Strong coupling between surface plasmon-polaritons and organic molecules in subwavelength hole arrays”, *Physical Review B*, **71**(3), 035424 (2005). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.035424>
- [85] P. Vasa, R. Pomraenke, S. Schwieger, Y.I. Mazur, V. Kunets, P. Srinivasan, and C. Lienau, “Coherent exciton–surface-plasmon-polariton interaction in hybrid metal-semiconductor nanostructures”, *Physical review letters*, **101**(11), 116801 (2008). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.116801>
- [86] B.I. Shapiro, E.S. Tyshkunova, A.D. Kondorskiy, and V.S. Lebedev, “Light absorption and plasmon–exciton interaction in three-layer nanorods with a gold core and outer shell composed of molecular J- and H-aggregates of dyes”, *Quantum Electronics*, **45**(12), 1153 (2015). <https://doi.org/10.1070/QE2015v045n12ABEH015869>
- [87] A.L. Rodarte, and A.R. Tao, “Plasmon–exciton coupling between metallic nanoparticles and dye monomers”, *The Journal of Physical Chemistry C*, **121**(6), 3496-3502 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b08905>
- [88] D. Wu, Y. Cheng, X. Wu, and X. Liu, “Exciton–plasmon couplings in plexcitonic CuCl–Ag nanoshells: Rabi splitting and induced transparency”, *JOSA B*, **31**(10), 2273-2277 (2014). <https://doi.org/10.1364/JOSAB.31.002273>
- [89] C.M. Guvenc, F.M. Balci, S. Sarisozen, N. Polat, and S. Balci, “Colloidal Bimetallic Nanorings for Strong Plasmon Exciton Coupling”, *The Journal of Physical Chemistry C*, **124**(15), 8334-8340 (2020). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c01011>
- [90] Y.B. Zheng, B.K. Juluri, L.L. Jensen, D. Ahmed, M. Lu, L. Jensen, and T.J. Huang, “Dynamic tuning of plasmon–exciton coupling in arrays of nanodisk–J-aggregate complexes”, *Advanced materials*, **22**(32), 3603-3607 (2010). <https://doi.org/10.1002/adma.201000251>
- [91] D. Melnikau, D. Savateeva, A. Susha, A.L. Rogach, and Y.P. Rakovich, “Strong plasmon-exciton coupling in a hybrid system of gold nanostars and J-aggregates”, *Nanoscale research letters*, **8**(1), 1-6 (2013). <https://doi.org/10.1186/1556-276X-8-134>
- [92] N. Waiskopf, Y. Ben-Shahar, and U. Banin, “Photocatalytic hybrid semiconductor–metal nanoparticles; from synergistic properties to emerging applications”, *Advanced Materials*, **30**(41), 1706697 (2018). <https://doi.org/10.1002/adma.201706697>
- [93] A.P. Manuel, A. Kirkey, N. Mahdi, and K. Shankar, “Plexcitonics—fundamental principles and optoelectronic applications”, *Journal of Materials Chemistry C*, **7**(7), 1821-1853 (2019). <https://doi.org/10.1039/C8TC05054F>
- [94] S.R.K. Rodriguez, J. Feist, M.A. Verschuuren, F.G. Vidal, and J. G. Rivas, “Thermalization and cooling of plasmon-exciton polaritons: towards quantum condensation”, *Physical review letters*, **111**(16), 166802 (2013). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.166802>
- [95] D. Akinwande, C.J. Brennan, J.S. Bunch, P. Egberts, J.R. Felts, H. Gao, and Y. Zhu, “A review on mechanics and mechanical properties of 2D materials—Graphene and beyond”, *Extreme Mechanics Letters*, **13**, 42-77 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.eml.2017.01.008>
- [96] T.W. Ebbesen, C. Genet, and S.I. Bozhevolnyi, “Surface-plasmon circuitry”, *Physics Today*, **61**(5), 44 (2008). <https://doi.org/10.1063/1.2930735>
- [97] Y. Li, Z. Li, C. Chi, H. Shan, L. Zheng, and Z. Fang, “Plasmonics of 2D nanomaterials: properties and applications”, *Advanced science*, **4**(8), 1600430 (2017). <https://doi.org/10.1002/advs.201600430>

- [98] P. Rivera, J.R. Schaibley, A.M. Jones, J.S. Ross, S. Wu, G. Aivazian, and X. Xu, "Observation of long-lived interlayer excitons in monolayer MoSe<sub>2</sub>-WSe<sub>2</sub> heterostructures", *Nature communications*, **6**(1), 1-6 (2015). <https://doi.org/10.1038/ncomms7242>
- [99] A. Ciarrocchi, D. Unuchek, A. Avsar, K. Watanabe, T. Taniguchi, and A. Kis, "Polarization switching and electrical control of interlayer excitons in two-dimensional van der Waals heterostructures", *Nature photonics*, **13**(2), 131-136 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41566-018-0325-y>
- [100] D. Unuchek, A. Ciarrocchi, A. Avsar, K. Watanabe, T. Taniguchi, and A. Kis, "Room-temperature electrical control of exciton flux in a van der Waals heterostructure", *Nature*, **560**(7718), 340-344 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0357-y>
- [101] P.A.D. Gonçalves, L.P. Bertelsen, S. Xiao, and N.A. Mortensen, "Plasmon-exciton polaritons in two-dimensional semiconductor/metal interfaces", *Physical Review B*, **97**(4), 041402 (2018). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.041402>
- [102] T. Roy, M. Tosun, J.S. Kang, A.B. Sachid, S.B. Desai, M. Hettick, and A. Javey, "Field-effect transistors built from all two-dimensional material components", *ACS nano*, **8**(6), 6259-6264 (2014). <https://doi.org/10.1021/nm501723y>
- [103] Q.H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J.N. Coleman, and M.S. Strano, "Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides", *Nature nanotechnology*, **7**(11), 699-712 (2012). <https://doi.org/10.1038/nnano.2012.193>
- [104] F. Withers, D. Pozo-Zamudio, A. Mishchenko, A.P. Rooney, A. Gholinia, K. Watanabe, and K.S. Novoselov, "Light-emitting diodes by band-structure engineering in van der Waals heterostructures", *Nature materials*, **14**(3), 301-306 (2015). <https://doi.org/10.1038/nmat4205>
- [105] D.H. Lien, M. Amani, S.B. Desai, G.H. Ahn, K. Han, J.H. He, and A. Javey, "Large-area and bright pulsed electroluminescence in monolayer semiconductors", *Nature communications*, **9**(1), 1-7 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41467-018-03218-8>
- [106] Y. Ye, Z.J. Wong, X. Lu, X. Ni, H. Zhu, X. Chen, and X. Zhang, "Monolayer excitonic laser", *Nature Photonics*, **9**(11), 733-737 (2015). <https://doi.org/10.1038/nphoton.2015.197>
- [107] S. Wu, S. Buckley, J.R. Schaibley, L. Feng, J. Yan, D.G. Mandrus, and X. Xu, "Monolayer semiconductor nanocavity lasers with ultralow thresholds", *Nature*, **520**(7545), 69-72 (2015). <https://doi.org/10.1038/nature14290>
- [108] J. Cheng, C. Wang, X. Zou, and L. Liao, "Recent advances in optoelectronic devices based on 2D materials and their heterostructures", *Advanced Optical Materials*, **7**(1), 1800441 (2019). <https://doi.org/10.1002/adom.201800441>
- [109] M. Sebek, A. Elbana, A. Nemati, J. Pan, Z.X. Shen, M. Hong, and J. Teng, "Hybrid Plasmonics and Two-Dimensional Materials: Theory and Applications", *Journal of Molecular and Engineering Materials*, **8**(01n02), 2030001 (2020). <https://doi.org/10.1142/S2251237320300016>
- [110] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I. Grigorieva, and A. Firsov, "Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in grapheme", *Nature*, **438**(7065), 197-200 (2005). <https://doi.org/10.1038/nature04233>
- [111] L. Britnell, R.M. Ribeiro, A. Eckmann, R. Jalil, B.D. Belle, A. Mishchenko, and K.S. Novoselov, "Strong light-matter interactions in heterostructures of atomically thin films", *Science*, **340**(6138), 1311-1314 (2013). <https://doi.org/10.1126/science.1235547>
- [112] C. Schneider, M.M. Glazov, T. Korn, S. Höfling, and B. Urbaszek, "Two-dimensional semiconductors in the regime of strong light-matter coupling", *Nature communications*, **9**(1), 1-9 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41467-018-04866-6>
- [113] E.H. Hwang, S. Adam, and S.D. Sarma, "Carrier transport in two-dimensional graphene layers", *Physical review letters*, **98**(18), 186806 (2007). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.186806>
- [114] S.D. Sarma, S. Adam, E.H. Hwang, and E. Rossi, "Electronic transport in two-dimensional grapheme", *Reviews of modern physics*, **83**(2), 407 (2011). <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.407>
- [115] A. Gupta, T. Sakhivel, and S. Seal, "Recent development in 2D materials beyond grapheme", *Progress in Materials Science*, **73**, 44-126 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2015.02.002>
- [116] J.K. Lee, S. Yamazaki, H. Yun, J. Park, G.P. Kennedy, G.T. Kim, and S. Roth, "Modification of electrical properties of graphene by substrate-induced nanomodulation", *Nano letters*, **13**(8), 3494-3500 (2013). <https://doi.org/10.1021/nl400827p>
- [117] M. Hildebrand, F. Abualnaja, Z. Makwana, and N.M. Harrison, "Strain engineering of adsorbate self-assembly on graphene for band gap tuning", *The Journal of Physical Chemistry C*, **123**(7), 4475-4482 (2019). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b09894>
- [118] T. Takahashi, K. Sugawara, E. Noguchi, T. Sato, and T. Takahashi, "Band-gap tuning of monolayer graphene by oxygen adsorption", *Carbon*, **73**, 141-145 (2014). <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2014.02.049>
- [119] K.S. Novoselov, O.A. Mishchenko, O.A. Carvalho, and A.H. Castro Neto, "2D materials and van der Waals heterostructures", *Science*, **353**(6298), aac9439 (2016). <https://doi.org/10.1126/science.aac9439>
- [120] M. Sebek, A. Elbana, A. Nemati, J. Pan, Z.X. Shen, M. Hong, and J. Teng, "Hybrid Plasmonics and Two-Dimensional Materials: Theory and Applications", *Journal of Molecular and Engineering Materials*, **8**(01n02), 2030001 (2020). <https://doi.org/10.1142/S2251237320300016>
- [121] D. Rodrigo, O. Limaj, D. Janner, D. Etezadi, F.J. García de Abajo, V. Pruneri, and H. Altug, "Mid-infrared plasmonic biosensing with graphene", *Science*, **349**(6244), 165-168 (2015). <https://www.science.org/doi/10.1126/science.aab2051>
- [122] F.H. Koppens, D.E. Chang, and F.J.G. de Abajo, "Graphene plasmonics: a platform for strong light-matter interactions", *Nano letters*, **11**(8), 3370-3377 (2011). <https://doi.org/10.1021/nl201771h>
- [123] A.C. Neto, F. Guinea, N.M. Peres, K.S. Novoselov, and A.K. Geim, "The electronic properties of graphene", *Reviews of modern physics*, **81**(1), 109 (2009). <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
- [124] J.W. You, S.R. Bongu, Q. Bao, and N.C. Panoui, "Nonlinear optical properties and applications of 2D materials: theoretical and experimental aspects", *Nanophotonics*, **8**(1), 63-97 (2019). <https://doi.org/10.1515/nanoph-2018-0106>
- [125] Z. Fei, A.S. Rodin, G.O. Andreev, W. Bao, A.S. McLeod, M. Wagner, and D.N. Basov, "Gate-tuning of graphene plasmons revealed by infrared nano-imaging", *Nature*, **487**(7405), 82-85 (2012). <https://doi.org/10.1038/nature11253>
- [126] A. Trenti, I.A. Calafell, L.A. Rozema, D.A. Iranzo, P.K. Jenke, J.D. Cox, and P. Walther, "Towards plasmonic-enhanced optical nonlinearities in graphene metal-heterostructures". In *The European Conference on Lasers and Electro-Optics. Optical Society of America* (p. cd\_9\_4, 2021, June). [https://opg.optica.org/abstract.cfm?URI=CLEO\\_Europe-2021-cd\\_9\\_4](https://opg.optica.org/abstract.cfm?URI=CLEO_Europe-2021-cd_9_4)
- [127] Y. Lu, J. Song, J. Yuan, L. Zhang, S.Q.Y. Wu, W. Yu, and Q. Bao, "Highly efficient plasmon excitation in graphene-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> heterostructure", *JOSA B*, **33**(9), 1842-1846 (2016). <https://doi.org/10.1364/JOSAB.33.001842>
- [128] M.M. Alsaif, K. Latham, M.R. Field, D.D. Yao, N.V. Medehkar, G.A. Beane, and K. Kalantar-zadeh, "Tunable plasmon resonances in two-dimensional molybdenum oxide nanoflakes", *Advanced Materials*, **26**(23), 3931-3937 (2014). <https://doi.org/10.1002/adma.20130609>

- [129] H. Yin, Y. Kuwahara, K. Mori, H. Cheng, M. Wen, Y. Huo, and H. Yamashita, “Localized surface plasmon resonances in plasmonic molybdenum tungsten oxide hybrid for visible-light-enhanced catalytic reaction”, *The Journal of Physical Chemistry C*, **121**(42), 23531-23540 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b08403>
- [130] H. Cheng, X. Qian, Y. Kuwahara, K. Mori, and H. Yamashita, “A plasmonic molybdenum oxide hybrid with reversible tunability for visible-light-enhanced catalytic reactions”, *Advanced Materials*, **27**(31), 4616-4621 (2015). <https://doi.org/10.1002/adma.201501172>
- [131] R.A. Maniyara, D. Rodrigo, R. Yu, J. Canet-Ferrer, D.S. Ghosh, R. Yongsunthon, and V. Pruneri, “Tunable plasmons in ultrathin metal films”, *Nature Photonics*, **13**(5), 328-333 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41566-019-0366-x>
- [132] P.A.D. Gonçalves, L.P. Bertelsen, S. Xiao, and N.A. Mortensen, “Plasmon-exciton polaritons in two-dimensional semiconductor/metal interfaces”, *Physical Review B*, **97**(4), 041402 (2018). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.041402>
- [133] X. Han, K. Wang, X. Xing, M. Wang, and P. Lu, “Rabi splitting in a plasmonic nanocavity coupled to a WS<sub>2</sub> monolayer at room temperature”, *ACS Photonics*, **5**(10), 3970-3976 (2018). <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.8b00931>
- [134] B. Chakraborty, J. Gu, Z. Sun, M. Khatoniar, R. Bushati, A.L. Boehmke, and V.M. Menon, “Control of strong light-matter interaction in monolayer WS<sub>2</sub> through electric field gating”, *Nano Letters*, **18**(10), 6455-6460 (2018). <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b02932>
- [135] P. Ni, A. De Luna Bugallo, V.M. Arellano Arreola, M.F. Salazar, E. Strupiechonski, V. Brandli, and P. Genevet, “Gate-tunable emission of exciton-plasmon polaritons in hybrid MoS<sub>2</sub>-gap-mode metasurfaces”, *ACS photonics*, **6**(7), 1594-1601 (2019). <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.9b00433>
- [136] V. Karanikolas, S. Suzuki, S. Li, and T. Iwasaki, “Perspective on 2D material polaritons and innovative fabrication techniques”, *Applied Physics Letters*, **120**(4), 040501 (2022). <https://doi.org/10.1063/5.0074355>

#### PLASMON-EXCITON INTERACTION IN PERSPECTIVE HETERO-SYSTEMS

Natalia Ohon<sup>a</sup>, Tetiana Bulavinets<sup>a</sup>, Iryna Yaremchuk<sup>a</sup>, Rostyslav Lesyuk<sup>a,b,c</sup>

<sup>a</sup>*Lviv Polytechnic National University, Department of Electronic Engineering  
S. Bandera str, 12, Lviv, Ukraine*

<sup>b</sup>*University of Rostock, Institute of Physics, St. A. Einstein 23, Rostock, Germany*

<sup>c</sup>*Pidstyhach Institute for applied problems of mechanics and mathematics of NAS of Ukraine, Naukova 3b, Lviv, Ukraine*

Surface plasmons and excitons have been widely studied experimentally and theoretically for various material systems. However, a number of aspects require further deeper study and understanding, among which the connection of these quasi-particles occupies an important place. New physical effects arise when plasmons and excitons in nanostructures begin to be localized at certain small distances, as a result, we can talk about their coupling. Complex systems containing the excitation of plasmons and excitons, as well as their coupling, show interesting optical properties that they cannot exhibit individually. In this type of system, the plasmon enhances the coupling between the system and the external field, and the exciton controls certain spectral properties, which opens up new possibilities for tuning their optical response. The transferred energy between plasmons and excitons becomes an important factor affecting their interaction when the resonance frequency of the localized plasmon is very close to the molecular energy transition frequency. Two types of coupling can occur depending on the ratio between the strength of the coupling and the energy losses of individual components in the system, namely strong and weak. In addition to the mutual coupling between the plasmon and the exciton, their different linewidths and ability to couple to an external field provide a variety of means to tune the optical properties of hybrid systems. Thus, it enables precise control of light at the nanometer scale, opening up possibilities for new electronics and photonics applications. In this review, we highlight the features of weak and strong modes of plasmon-exciton coupling, modern trends, and perspectives in the study of hetero-systems semiconductor-metal, metal-2D material, semiconductor-molecule, etc. Semiconductor-metal hybrid nanostructures open up exciting opportunities for the study of quantum phenomena, optical processes, and multiparticle interactions and confidently lead to application in new photonics devices.

**Keywords:** surface plasmons, excitons, plasmon-exciton coupling

## A BIO-THERMAL CONVECTION IN A POROUS MEDIUM SATURATED BY NANOFUID CONTAINING GYROTACTIC MICROORGANISMS UNDER AN EXTERNAL MAGNETIC FIELD<sup>†</sup>

 Michael I. Kopp<sup>a\*</sup>, 
  Volodymyr V. Yanovsky<sup>a,b</sup>, 
  Ulavathi S. Mahabaleshwar<sup>c</sup>

<sup>a</sup>*Institute for Single Crystals, Nat. Academy of Science Ukraine,  
Nauky Ave. 60, Kharkiv 31001, Ukraine*

<sup>b</sup>*V.N. Karazin Kharkiv National University  
4, Svoboda Sq., Kharkiv, 61022, Ukraine*

<sup>c</sup>*Department of Mathematics, Shivagangotri, Davangere University, Davangere, India 577 007*

<sup>\*</sup>*Corresponding Author: [michaelkopp0165@gmail.com](mailto:michaelkopp0165@gmail.com)*

Received September 23, 2022; revised October 30, 2022; accepted November 3, 2022

The study of thermal convection in porous media saturated by nanofluid and microorganisms is an important problem for many geophysical and engineering applications. The concept of a mixture of nanofluids and microorganisms has attracted the interest of many researchers due to its ability to improve thermal properties and, as a result, heat transfer rates. This property is actively used both in electronic cooling systems and biological applications. Thus, the purpose of this research is to study biothermal instability in a porous medium saturated by a water-based nanofluid containing gyrotactic microorganisms in the presence of a vertical magnetic field. Given the presence of an external magnetic field in both natural and technological situations, we were motivated to perform this theoretical research. Using the Darcy-Brinkman model, a linear analysis of the convective instability has been considered for both-free boundaries, taking into account the effects of Brownian diffusion and thermophoresis. The Galerkin method was used to perform this analytical study. We have established that heat transfer is accomplished by stationary convection without oscillatory movements. In stationary convection regimes, metal oxide nanofluids ( $Al_2O_3$ ), metallic nanofluids ( $Cu, Ag$ ), and semiconductor nanofluids ( $TiO_2, SiO_2$ ) are analyzed. Increasing the Chandrasekhar and Darcy numbers improve system stability significantly, but increasing porosity and modified bioconvection Rayleigh-Darcy number speed up the beginning of instability. To determine the transient behavior of heat and mass transports, a non-linear theory based on the representation of the Fourier series method is applied. In small time intervals, the transitional Nusselt and Sherwood numbers exhibit an oscillatory character. The Sherwood numbers (mass transfer) in the time interval reach stationary values faster than the Nusselt numbers (heat transfer). This research might help with seawater convection in the oceanic crust as well as the construction of biosensors.

**Keywords:** nanofluid, bio-thermal convection, Lorentz force, thermophoresis, Brownian motion, gyrotactic microorganism, magnetic field

**PACS:** 44.10.+i, 44.30.+v, 47.20.-k

### 1. INTRODUCTION

Many theoretical and practical study in fields such as soil mechanics, groundwater hydrology, petroleum engineering, industrial filtration, powder metallurgy, nuclear energy, and so on have been based on the study of the physics of flow through a porous media. Such flows through porous media are of great interest to petroleum engineers and geophysical fluid dynamicists. The problem of thermal instability of a liquid layer in a porous medium is of special importance. Ingham and Pop [1] as well as Nield and Bejan [2] provide excellent reviews of the most of the studies on convection in porous media. The issues of fluid flow and heat transfer in rotating porous media have been studied in detail in a recent review by Vadasz [3].

Objects with dimensions of less than one hundred nanometers have developed as a result of the progress of nanotechnology. Such nanosized objects are called nanoparticles. Choi [4] proposed suspending these nanoparticles in a base fluid (known as nanofluid) to improve heat conductivity and convective heat transfer of the base fluid. Thus, nanofluids began to be intensively used in industry, such as coolants, lubricants, heat exchangers, microchannel radiators, and many others. Buongiorno [5] extensively studied convective transport in nanofluids and concentrated on explaining the additional heat transfer increases observed under convective flows. Tzou [6] used Buongiorno transport equations to study the onset of convection in a horizontal layer uniformly heated from below for a nanofluid and discovered that due to Brownian motion and thermophoresis of nanoparticles, the critical Rayleigh number is much lower, by one to two orders of magnitude, than that of an ordinary fluid.

Because of the remarkable characteristics of nanofluids in heat transfer phenomena, research involving nanofluids in a porous media has become required. Kuznetsov and Nield [7]-[8] used the Brinkman model to investigate the onset of thermal instability in a porous media saturated with a nanofluid, taking into account Brownian motion and nanoparticle thermophoresis. They discovered that the presence of nanoparticles may significantly lower or increase the critical thermal Rayleigh number, depending on whether the basic nanoparticle distribution is top-heavy or bottom-heavy. Further, Bhadauria and Agarwal [9] and Yadav et al. [10] extended the thermal instability problem by including

<sup>†</sup> Cite as: M.I. Kopp, V.V. Yanovsky, and U.S. Mahabaleshwar, East Eur. J. Phys. 4, 23 (2022), <https://doi.org/10.26565/2312-4334-2022-4-02>  
© M.I. Kopp, V.V. Yanovsky, U.S. Mahabaleshwar, 2022

the Coriolis force term (rotation) in momentum equations for porous and non-porous materials, concluding that including the Coriolis force component made the overall system more stable. Bhadauria and Agarwal [9] made a nonlinear investigation of nanofluid convection in a rotating porous layer in terms of Nusselt number. Chand and Rana [11] used the Darcy-Brinkman model to investigate the influence of rotation on nanofluid convection. For stationary convection, an equation for the thermal Rayleigh number was found. Gupta et al. [12] studied the onset of convection in a horizontal nanofluid layer in the presence of a vertical magnetic field and discovered that stability increases as the magnetic field value increases. The effects of a magnetic field on a horizontal layer of nanofluid have several significant characteristics, making it necessary to explore the effects of a magnetic field in a porous medium. Ahuja et al. [13] used the Darcy-Brinkman model to explore the thermal convection of a nanofluid layer in the presence of an applied vertical magnetic field saturated by a porous medium for both-free, rigid-free, and both-rigid barriers. The effect of an externally applied magnetic field on the stability of a binary nanofluid layer in porous medium is considered by Sharma et al. [14]. It was established that semiconducting nanofluids are found to be more stable than metallic nanofluids. Furthermore, porosity destabilizes the layer while solute difference (at the boundaries of the layer) stabilizes it and the magnetic field stabilizes the fluid layer system significantly. Yadav et al. [15] investigated the effect of Hall current on the criterion for the onset of MHD convection in a porous medium layer saturated by a nanofluid. They were shown that the increase in the Hall current parameter, the Lewis number, the modified diffusivity ratio, and the concentration Rayleigh Darcy number is to hasten the onset of convection while the magnetic Darcy number, the porosity parameter and the Darcy number have stabilized on the onset of convection. Ahuja and Gupta [16] investigated the onset of thermal convection of a porous nanofluid layer under the combined influence of rotation and magnetic field using the Darcy-Brinkman model. As shown in [16], the stability of the system enhances with the rise in Chandrasekhar number and Taylor number whereas it falls with the rise in porosity. According to [16] silver nanoparticles stabilized water-based fluids better than copper nanoparticles, while  $TiO_2$  nanoparticles in semiconductors improve system stability better than  $SiO_2$  nanoparticles.

A detailed review of the current state of the problem of MHD convection in nanofluids presents in [17]. The article [18] discusses a new review devoted to the subject of Rayleigh-Benard instability in a nanofluid. In addition to the above, a relatively new area of research: bioconvection inside a nanofluid is of great importance in applied problems of creating biosensors, microdevices for measuring the toxicity of nanoparticles. Bioconvection is the movement of a fluid medium caused by a directed flow of microorganisms that results in a redistribution of the medium's density. As a result, hydrodynamic processes in the medium emerge, analogous to natural convection in the presence of temperature gradients. Bioconvection takes into account the movement of bacteria and algae, with microorganisms having a higher density than water. Microorganisms can move due to gravity forces (gyrotactic microorganisms), oxygen concentration gradients (oxytactic microorganisms), light radiation (phototaxis microorganisms), nutrition gradients (chemotaxis microorganisms), and other factors. The number of self-propelled microorganisms can be quite considerable, varying from  $10^7 \text{ cm}^{-3}$  in a low concentration regime to  $10^{11} \text{ cm}^{-3}$  in a turbulent regime with almost densely packed microorganisms. A linear theory of the stability of bioconvection of gyrotactic microorganisms in a finite depth layer of an ordinary fluid was developed by Pedley et al. [19]-[21]. In these works, the criteria for the onset of a bioconvective flow were determined. Avramenko [22] based on the Lorenz approach [23] a nonlinear theory of bioconvection for gyrotactic microorganisms in a layer of ordinary liquid was developed. In [22], the boundaries of various hydrodynamic regimes of two-dimensional bioconvection were determined.

Unlike microorganisms, nanoparticles are not self-propelled, move due to Brownian motion and thermophoresis, and are driven by fluid flow. Kuznetsov's [24],[25] works are devoted to the interaction of nanofluids with bioconvection. The paper [24] investigated the possibility of oscillatory instability in a nanofluid suspension containing oxidate bacteria. In [25] analyzes the combined influence on the onset of biothermal convection in suspension, nanoparticles, gyrotactic microorganisms, and algae. A linear analysis of the instability is performed, allowing the bounds of the oscillatory instability to be determined. The destabilizing effect of Brownian motion and thermophoresis of nanoparticles, vertical throughflow, and gyrotactic microorganisms on biothermal instability was discovered by Saini and Sharma [26].

Because of the practical nature of the problem, a significant number of works (for example, [27-31]) have recently arisen that investigate two-dimensional magnetohydrodynamic flows and the processes of heat and mass transfer of a watery nanofluid, including gyrotactic microorganisms. The effects of buoyancy, Brownian motion, thermophoresis, and chemical reactivity on bioconvection of nanofluidic gyrotactic microorganisms are investigated in these papers. The aim of using microorganisms is to stabilize nanoparticle suspensions created by bioconvection caused by the combined effects of buoyancy and magnetic field forces.

There are a lot of publications on the effect of gyrotactic microorganisms on nanofluid flows in bounded porous media. The study of biological processes in porous media has recently rapidly progressed. Kuznetsov, Nield, and Avramenko [32-36] made a significant contribution to the dynamics of biological processes in porous media. A linear analysis of biothermal convection based on the Darcy-Brinkman model in a suspension of gyrotactic microorganisms in a highly porous medium heated from below was carried out in [37]. The following conclusions [37] were drawn there: a suspension containing faster-swimming cells is more unstable; gyrotaxis contributes to the development of bioconvection instability; the modified Darcy number associated with the effective viscosity stabilizes the slurry.



Recently, the flow of boundary layers of natural convection nanofluids over a vertical flat plate embedded in a saturated porous Darcy medium containing gyrotactic microorganisms was studied in studies[38]-[40]. The effects of dimensionless parameters, such as the Lewis number of bioconvection, the Rayleigh number of bioconvection, the Peclet number of bioconvection, the Brownian motion parameter, the buoyancy coefficient, the thermophoresis parameter, the index of change of the power law, and the Lewis number, on the flow characteristics of the bioconvection process are analyzed during a numerical solution.

Despite significant progress in the study of bioconvection in porous media, the impact of gyrotactic organisms on thermal instability in a layer of a porous media saturated by a nanofluid under the action of a magnetic field has yet to be investigated. Of particular interest is the study of the linear and nonlinear stages of bio-thermal convection in a porous medium saturated with nanofluid for various types of nanoparticles such as metal, metal oxides, and semiconductor nanoparticles under an external magnetic field. The aim of this paper is to investigate the abovementioned problem.

The content of the paper is presented in the following sections. The Introduction (section 1) presents a review of the literature on this issue. In section 2, we describe the problem statement and obtain evolution equations in the Boussinesq-Oberbeck approximation in a layer of a Darcy-Brinkman porous medium saturated by an electrically conducting nanofluid with gyrotactic microorganisms. In section 3, we obtained equations for the basic state and small perturbations in dimensionless form. The equation for the vertical component of the perturbed velocity was obtained using the elimination of variables technique. This equation is supplemented with conditions for free-free boundaries. In section 4, we derive a general dispersion equation taking into account the effects of a vertical magnetic field, gyrotactic microorganism bioconvection, Brownian diffusion of nanoparticles, and thermophoresis. The oscillatory and stationary regimes of mixed convection are considered. In section 5, we study the non-linear theory based on the representation of the Fourier series method used to find the temporary behavior of heat and mass transports. In section 6, we analyze the linear regime of stationary convection and calculate the expressions for heat and mass transports. In section 7, we perform a numerical/graphical analysis of the development of stationary convection carried out for oxide metal, metallic, and semiconductor nanofluids. Convective heat and mass transfers in terms of Nusselt number  $Nu(t)$  and Sherwood number  $Sh(t)$  were calculated. The Conclusions present the main conclusions of this paper.

## 2. STATEMENT OF THE PROBLEM AND BASIC EQUATIONS

Let us consider an infinite horizontal layer of incompressible electrically conductive nanofluid containing nanoparticles and gyrotactic microorganisms in a homogenous porous medium. Initially, a homogeneous porous layer with a thickness of  $h$  is assumed to be at rest. Heating from below the layer causes disturbance, where  $T_d, T_u$  are the temperatures and  $\phi_d, \phi_u$  ( $\phi_u > \phi_d$ ) are the volume fractions of nanoparticles at the lower and upper boundaries, respectively (as shown in Fig. 1). The presence of nanoparticles is considered to not affect the direction and speed with which microorganisms swim. Physically, this is possible if a flow generated by bioconvection exists for a small concentration of nanoparticles. The terminology for nanoparticles are written using Buongiorno's [5] theory, whereas those for gyrotactic microorganisms are written using Pedley's [19]-[21] approach.

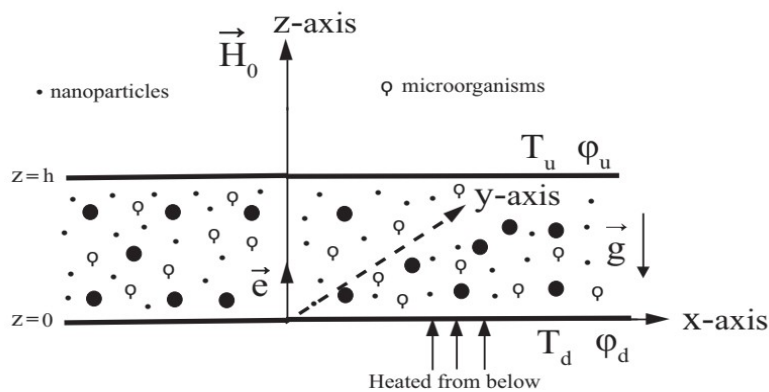


Figure 1. Geometry and coordinate system of the problem

Fig. 1 depicts the problem's geometry. We used the Cartesian coordinates  $(x, y, z)$  with the  $z$ -axis points vertically upward. The gravitational force  $\vec{g} = (0, 0, -g)$  acts vertically downwards, while the magnetic field  $\vec{H}_0 = (0, 0, H_0)$  acts vertically upwards.  $\vec{V}_D$  is the Darcy velocity, which is related to the nanofluid velocity  $\vec{V}$  as  $\vec{V}_D = \varepsilon \vec{V}$ . The physical model of our problem consists of the following assumptions:

- All thermophysical characteristics are constant except for density in the buoyant force (Boussinesq approximation).

- Because the fluid phase, microorganisms, and nanoparticles are in a condition of thermal equilibrium, the heat flow may be described using a one equation model.
- Nanofluid is incompressible, electrically conducting, viscous, laminar, and nanoparticles are non-magnetic spherical particles.
- Each boundary wall is assumed to be impermeable and perfectly thermal conducting.
- The porous material is completely saturated with a nanofluid in which microorganisms can swim.
- The material's pores must be big enough to accommodate biological organisms and their movement.
- The solid porous matrix does not absorb microorganisms, and each one has the same volume and form, as well as swimming at the same speed.
- The heating from below has no influence on the cells' gyrotactic activity and does not kill them.

According to the above assumptions, the bioconvective motion of gyrotactic microorganisms in a porous medium saturated with nanofluid in the presence of a magnetic field will be described using the Darcy-Brinkman model. Let's suppose that a suspension of swimming microorganisms and nanoparticles is incompressible, and therefore

$$\nabla \cdot \vec{V}_D = 0, \tag{1}$$

The conservation equation for the nanoparticles given by

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \left( \frac{\vec{V}_D}{\varepsilon} \cdot \nabla \right) \phi = D_B \nabla^2 \phi + \frac{D_T}{T_u} \nabla^2 T, \tag{2}$$

The conservation equation of cells is given by [20, 32,33]

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\text{div}(n\vec{V}_D + nW_c\vec{l} - D_m \nabla n), \tag{3}$$

The momentum equation can be written using the Boussinesq approximation [7] as

$$\frac{\rho_0}{\varepsilon} \frac{\partial \vec{V}_D}{\partial t} = -\nabla P + \tilde{\mu} \nabla^2 \vec{V}_D - \frac{\mu}{K} \vec{V}_D + \frac{\mu_\varepsilon}{4\pi} (\vec{H} \cdot \nabla) \vec{H} + \vec{g}[\phi \rho_p + (1-\phi)\rho_0(1-\beta(T-T_u))] + \vec{g}(\delta\rho)\mathcal{V}n \tag{4}$$

here the buoyancy force is made up of three different components: the fluid's temperature change, the distribution of nanoparticles (nanoparticles are heavier than water), and the concentration of microorganisms (microorganisms are also heavier than water). In equation (4), the external magnetic field is taken into account with the help of an additional force, the Lorentz force, which affects the movement of the electrically conductive nanofluid.

The thermal energy conservation equation is

$$(\rho c)_m \frac{\partial T}{\partial t} + (\rho c)_f \vec{V}_D \cdot \nabla T = k_m \nabla^2 T + \varepsilon(\rho c)_p \left( D_B \nabla \phi \cdot \nabla T + D_T \frac{\nabla T \cdot \nabla T}{T_1} \right) \tag{5}$$

The inductive magnetic fields caused by convective flows of an electrically conductive nanofluid is described by the following equations [41]

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \left( \frac{V_D}{\varepsilon} \cdot \nabla \right) H = (H\nabla) \frac{V_D}{\varepsilon} + \eta \nabla^2 H \tag{6}$$

$$\nabla \cdot \vec{H} = 0, \tag{7}$$

here  $\rho = \phi\rho_p + (1-\phi)\rho_f$  is the nanofluid density,  $\rho_0 = \phi\rho_p + (1-\phi)\rho_{f0}$  is the nanofluid reference density,  $\rho_p$  and  $\rho_f$  are the density of nanoparticle and base fluid, respectively.  $\rho_{f0}$  is the base fluid density at the reference temperature  $T_u$ ,  $\phi$  is the volumetric fraction of nanoparticles.  $D_B$  and  $D_T$  denote the Brownian diffusion coefficient and thermophoretic diffusion, respectively.  $(\rho c)_f, (\rho c)_p, (\rho c)_m$  are fluid heat capacity, nanoparticles heat capacity and medium heat capacity, respectively.  $n$  is the concentration of microorganisms,  $\delta\rho$  is the density difference between microorganisms and a base fluid:  $\rho_m - \rho_f$ ,  $\mathcal{V}$  is the average volume of a microorganism,  $D_m$  is the diffusivity of microorganisms. We assumed that random motions of microorganisms are simulated by a diffusion process.  $W_c\vec{l}$  is the average microorganism swimming velocity ( $W_c$  is constant,  $\vec{l}$  is a unit vector of movement of microorganisms).  $P$  is the pressure,  $\beta$  is the thermal expansion coefficient,  $\vec{e} = (0,0,1)$  is a unit vector in the direction of the axis  $z$ .  $\varepsilon$  is the

porosity of the porous medium,  $K$  is the permeability of the porous medium,  $\tilde{\mu}$  is the effective viscosity,  $\mu$ ,  $\eta$  and  $\mu_e$  are the viscosity, magnetic viscosity and magnetic permeability of nanofluid, respectively.

We assume that the temperature and volume fraction of nanoparticles have fixed values at the boundaries of the porous layer.

$$w = 0, \quad T = T_d, \quad \phi = \phi_d, \quad \vec{J} \cdot \vec{e} = 0, \quad \text{at } z = 0 \quad (8)$$

$$w = 0, \quad T = T_u, \quad \phi = \phi_u, \quad \vec{J} \cdot \vec{e} = 0, \quad \text{at } z = h, \quad (9)$$

where  $\vec{J} = n \frac{\vec{V}_D}{\varepsilon} + n W_c \vec{l} - D_m \nabla n$  is the flux of microorganisms.

Let us introduce the following non-dimensional parameters

$$(x^*, y^*, z^*) = \frac{(x, y, z)}{h}, \quad \vec{V}_D^*(u^*, v^*, w^*) = \vec{V}_D(u, v, w) \frac{h}{\alpha_m}, \quad t^* = \frac{t \alpha_m}{h^2 \sigma},$$

$$P^* = \frac{PK}{\mu \alpha_m}, \quad \alpha_m = \frac{k_m}{(\rho c)_f}, \quad \tilde{\sigma} = \frac{(\rho c)_m}{(\rho c)_f}, \quad n^* = \frac{n}{N_0}, \quad (10)$$

$$\vec{H}^* = \frac{\vec{H}}{H_0}, \quad \phi^* = \frac{\phi - \phi_d}{\phi_u - \phi_d}, \quad T^* = \frac{T - T_u}{T_d - T_u},$$

where  $N_0 = \text{const}$  is average concentration of microorganisms in the layer. Using expressions (10) and omitting the asterisks, we get the following system of dimensionless equations

$$\nabla \cdot \vec{V}_D = 0, \quad (11)$$

$$\frac{1}{\tilde{\sigma}} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \left( \frac{\vec{V}_D}{\varepsilon} \cdot \nabla \right) \phi = \frac{1}{L_e} \nabla^2 \phi + \frac{N_A}{L_e} \nabla^2 T, \quad (12)$$

$$\frac{1}{\sigma} \frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot \left( n \vec{V}_D + \frac{Pe}{L_b} n \vec{l} - \frac{1}{L_b} \nabla n \right), \quad (13)$$

$$\frac{1}{\mathcal{V}_a} \frac{\partial \vec{V}_D}{\partial t} = -\nabla P + D_a \nabla^2 \vec{V}_D - \vec{V}_D - \bar{e} R_m - \bar{e} R_n \phi - \bar{e} \frac{R_b}{L_b} N +$$

$$+ \bar{e} Ra T + Q \frac{Pr}{Pm} (\vec{H} \cdot \nabla) \vec{H} \quad (14)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{V}_D \nabla) T = \nabla^2 T + \frac{N_B}{L_e} \nabla \phi \cdot \nabla T + \frac{N_A N_B}{L_e} (\nabla T)^2, \quad (15)$$

$$\frac{1}{\sigma} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} + \left( \frac{\vec{V}_D}{\varepsilon} \cdot \nabla \right) \vec{H} = (\vec{H} \cdot \nabla) \frac{\vec{V}_D}{\varepsilon} + \frac{Pr}{Pm} \nabla^2 \vec{H}, \quad (16)$$

$$\nabla \cdot \vec{H} = 0. \quad (17)$$

In Eqs. (11)-(17), we introduced the following dimensionless parameters:

$\mathcal{V}_a = \frac{\varepsilon Pr \tilde{\mu} (\rho c)_m}{D_a \mu (\rho c)_f}$  is the modified Vadasz number,  $D_a = \frac{\tilde{\mu} K}{\mu h^2}$  is the Darcy number,  $Pr = \frac{\mu}{\rho_0 \alpha_m}$  is the Prandtl number,  $Pm = \frac{\mu}{\rho_0 \eta}$  is the magnetic Prandtl number,  $L_e = \frac{\alpha_m}{D_B}$  is the nanoparticle Lewis number,  $L_b = \frac{\alpha_m}{D_m}$  is the

bioconvection Lewis number,  $Q = \frac{\mu_e H_0^2 K}{4\pi\mu\eta}$  is the Chandrasekhar-Darcy number,  $R_b = \frac{ghN_0(\delta\rho)\nu K}{\mu D_m}$  is the bioconvection Rayleigh-Darcy number,  $R_m = \frac{[\rho_p\phi_d + \rho_0(1-\phi_d)](ghK)}{\mu\alpha_m}$  is the basic density Rayleigh-Darcy number,  $R_n = \frac{(\rho_p - \rho_0)(\phi_u - \phi_d)ghK}{\mu\alpha_m}$  is the concentration Rayleigh-Darcy number,  $Ra = \frac{\rho_0 ghK \beta(T_d - T_u)}{\mu\alpha_m}$  is the Rayleigh-Darcy number,  $N_B = \frac{\varepsilon(\rho c)_p}{(\rho c)_f}(\phi_u - \phi_d)$  is the modified nanoparticles density,  $N_A = \frac{D_T(T_d - T_u)}{D_B T_u(\phi_u - \phi_d)}$  is the modified diffusivity ratio,  $Pe = \frac{W_c h}{D_m}$  is bioconvection Peclet number.

Eq. (14) has been linearized using a small temperature gradient in a dilute suspension of nanoparticles and microorganisms using the Boussinesq approximation. Equations (11)-(17) are supplemented with boundary conditions in non-dimensional form:

$$w = 0, \quad T = 1, \quad \phi = 0, \quad Pen = \frac{dn}{dz}, \quad \text{at } z = 0, \tag{18}$$

$$w = 0, \quad T = 0, \quad \phi = 1, \quad Pen = \frac{dn}{dz}, \quad \text{at } z = 1. \tag{19}$$

## 2. EQUATIONS FOR PERTURBATIONS

Let's start with the assumption that the fluid layer is at rest. The physical system is then moved slightly out of its equilibrium position. We assume that all variables in Eqs. (11)-(17) can describe the sum of the steady and perturbed components:

$$V_b = 0, \quad P = P_b(z) + p', \quad T = T_b(z) + T', \quad \phi = \phi_b(z) + \phi', \quad n = n_b(z) + n', \quad \vec{l} = \vec{e} + \vec{m}'. \tag{20}$$

The steady profiles of temperature  $T_b(z)$  and the volume fraction of nanoparticles  $\phi_b(z)$  are found from the solutions of the equations

$$\frac{d^2 T_b}{dz^2} + \frac{N_B}{L_e} \frac{d\phi_b}{dz} \frac{dT_b}{dz} + \frac{N_A N_B}{L_e} \left( \frac{dT_b}{dz} \right)^2 = 0, \tag{21}$$

$$\frac{d^2 \phi_b}{dz^2} + N_A \frac{d^2 T_b}{dz^2} = 0.$$

Taking into account the experimental data for most nanofluids [5], a good approximation of the base state (21) is a linear dependence on  $z$  for  $T_b(z)$  and  $\phi_b(z)$  (see, for example, [16]):

$$T_b(z) = 1 - z, \quad \phi_b(z) = z. \tag{22}$$

The pressure distribution in the ground state satisfies the equation

$$\frac{dP_b(z)}{dz} = -R_m - R_n \phi_b(z) - \frac{R_b}{L_b} N_b(z) + Ra T_b(z), \tag{23}$$

from which the explicit form  $P_b(z)$  may be found by integration. The stationary profile of the concentration of microorganisms  $n_b(z)$  is determined by the following expression [19]

$$n_b(z) = N_0 \cdot \frac{Pe \exp(zPe)}{\exp(Pe) - 1}, \tag{24}$$

For the case of small Peclet numbers  $Pe$ , it follows from (24) that  $n(z) \approx N_0 = const$ . Following the approach as in article [22], to simplify the, we will focus on this case.

According to publications[19],[ analysis 32], the equation for the perturbation of a unit vector indicating the direction of swimming of microorganisms has the following form:

$$\hat{m}' = \mathcal{B}\zeta\vec{i} - \mathcal{B}\xi\vec{j} + 0 \cdot \vec{e}, \quad (25)$$

where  $\vec{i}$  and  $\vec{j}$  are the unit vectors in the  $x$ - and  $y$ -directions, respectively.  $\mathcal{B} = (3\tilde{\mu} / \rho_m g d)(\alpha_m / h^2)$  is a dimensionless parameter characterizing the reorientation of microorganisms under the action of a gravitational moment against viscous resistance,  $d$  is the displacement of the center of mass of the cell from the center of buoyancy. In Eq. (25), the parameters  $\zeta$  and  $\xi$  in the  $x$ - and  $y$ -components of vector  $\hat{m}'$  are

$$\zeta = -(1 - \alpha_0) \frac{\partial w'}{\partial x} + (1 + \alpha_0) \frac{\partial u'}{\partial z}, \quad (26)$$

$$\xi = (1 - \alpha_0) \frac{\partial w'}{\partial y} - (1 + \alpha_0) \frac{\partial v'}{\partial z}.$$

$\alpha_0$  is the cell eccentricity which is given by the following equation [19,32]:

$$\alpha_0 = \frac{r_{max}^2 - r_{min}^2}{r_{max}^2 + r_{min}^2}, \quad (27)$$

where  $r_{max}$  and  $r_{min}$  are the semi-major and semi-minor axes of the spheroidal cell.

Taking into account Eqs. (25)-(26), we get the following equation for the perturbation of the cell number density:

$$\frac{1}{\sigma} \frac{\partial n'}{\partial t} + \frac{Pe}{L_b} \frac{dn'}{dz} - PeG \left[ (1 + \alpha_0) \frac{d^2 w'}{dz^2} + (1 - \alpha_0) \left( \frac{\partial^2 w'}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w'}{\partial y^2} \right) \right] = \frac{1}{L_b} \nabla^2 n', \quad (28)$$

where  $G = D_m \mathcal{B} / h^2$  is a dimensionless orientation parameter [22].

After substituting (20) into the equations (12)-(16), we get equations for the variables  $u', v', w', T', \phi', b'$ , which are also linearized. Further, the analysis of equations for the perturbation will be investigated by the method of normal modes, assuming that the perturbing quantities have the following form:

$$[u', v', w', T', \phi', n', b'] = [U(z), V(z), W(z), \Theta(z), \Phi(z), N(z), B(z)] e^{i(k_x x + k_y y + \gamma t)}, \quad (29)$$

where  $k_x, k_y$  are the wave number along the  $x$  and  $y$  directions, and  $a = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  is the horizontal wave number of the disturbances. The growth rate parameter is denoted by  $\gamma$ .

Using (29), we get the linearized equations in dimensionless form after a few simple but cumbersome transformations:

$$\left( D_a (D^2 - a^2) - \frac{\gamma}{\nu_a} - 1 \right) (D^2 - a^2) W - a^2 Ra \Theta + a^2 R_n \Phi + \frac{a^2 R_b}{L_b} N + \frac{QPr}{Pm} D (D^2 - a^2) B_z = 0, \quad (30)$$

$$\left( D^2 - a^2 - \gamma + \frac{N_B}{L_e} (1 - 2N_A) D \right) \Theta - \frac{N_B}{L_e} D \Phi + W = 0, \quad (31)$$

$$\left( D^2 - a^2 - \frac{\gamma L_e}{\sigma} \right) \Phi + N_A (D^2 - a^2) \Theta - \frac{L_e W}{\varepsilon} = 0, \quad (32)$$

$$\left( \frac{1}{L_b} (D^2 - a^2) - \frac{Pe}{L_b} D - \frac{\gamma}{\sigma} \right) N + PeG ((1 + \alpha_0) D^2 - (1 - \alpha_0) a^2) W = 0, \quad (33)$$

$$\left( \frac{Pr}{Pm} (D^2 - a^2) - \frac{\gamma}{\sigma} \right) B_z + \frac{DW}{\varepsilon} = 0. \quad (34)$$

The system of equations (30)-(34) is reduced to one equation for  $W$  using the elimination of variables technique

$$\left[ \begin{aligned} & \hat{L}\hat{L}_D\hat{L}_\phi\hat{L}_B\hat{L}_N(D^2 - a^2) + a^2 Ra\hat{L}_\phi\hat{L}_B\hat{L}_N\left(\hat{L}_\phi - \frac{N_B}{\varepsilon}D\right) + \\ & + a^2 R_n\hat{L}_B\hat{L}_N\left(\hat{L}\frac{L_e}{\varepsilon} + N_A(D^2 - a^2)\left(\hat{L}_\phi - \frac{N_B}{\varepsilon}D\right)\right) - \\ & - a^2 \frac{R_b}{L_b}\alpha\hat{L}\hat{L}_\phi\hat{L}_B - \frac{QPr}{\varepsilon Pm}\hat{L}\hat{L}_\phi\hat{L}_N D^2(D^2 - a^2) \end{aligned} \right] W = 0, \quad (35)$$

where the operators are

$$\begin{aligned} \hat{L} &= \hat{L}_T\hat{L}_\phi + \frac{N_B}{L_e}(1 - 2N_A)\hat{L}_\phi D + \frac{N_A N_B}{L_e}(D^2 - a^2)D, \\ \hat{L}_T &= \hat{D}^2 - a^2 - \gamma, \quad \hat{\alpha} = PeG((1 + \alpha_0)D^2 - (1 - \alpha_0)a^2), \\ \hat{L}_D &= D_a(D^2 - a^2) - \gamma\mathcal{V}_a^{-1} - 1, \quad \hat{L}_\phi = D^2 - a^2 - \gamma\frac{L_e}{\sigma}, \\ \hat{L}_N &= \frac{1}{L_b}(D^2 - a^2) - \frac{Pe}{L_b}D - \frac{\gamma}{\sigma}, \quad \hat{L}_B = \frac{Pr}{Pm}(D^2 - a^2) - \frac{\gamma}{\sigma}. \end{aligned}$$

Eq. (33) is supplemented with boundary conditions for free boundaries

$$W = D^2W = 0 \quad \text{at } z = 0, 1. \quad (36)$$

Equation (35) describes bioconvection in a layer of a porous medium saturated by an electrically conducting nanofluid in an external vertical magnetic field. Further, we will use a single term approximation of Galerkin method to solve (35).

### 3. OSCILLATING AND STATIONARY CONVECTION REGIMES

The eigenfunctions  $W$  of equation (35) take the form of a simple harmonic for free boundary conditions (39):

$$W = W_0 \sin \pi z, \quad (37)$$

where  $W_0$  is constant. By substituting (40) for (38) and integrating across the layer thickness  $z = (0, 1)$ , the characteristic equation is obtained, with Rayleigh number  $Ra$  as the eigenvalue:

$$\begin{aligned} Ra &= \left( \frac{(\pi^2 + a^2)\Gamma_D\Gamma_T}{a^2} + \frac{QPr}{\varepsilon Pm} \frac{\Gamma_T}{a^2\Gamma_B} \pi^2(\pi^2 + a^2) \right) \frac{(1 + P_{N_2})}{\left(1 - \frac{P_{N_1}}{\Gamma_\phi}\right)} - \\ & - \frac{R_n}{\Gamma_\phi - P_{N_1}} \left( \frac{L_e}{\varepsilon}\Gamma_T + N_A(\pi^2 + a^2) + P_{N_1}(1 - 2N_A) \right) - \frac{\left(\frac{R_b}{L_b}\right)\Gamma_\alpha\Gamma_T}{\Gamma_N\left(1 - \frac{P_{N_1}}{\Gamma_\phi}\right)}, \quad (38) \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} \Gamma_D &= D_a(\pi^2 + a^2) + \gamma\mathcal{V}_a^{-1} + 1, \quad \Gamma_T = \pi^2 + a^2 + \gamma, \quad \Gamma_N = \frac{1}{L_b}(\pi^2 + a^2) + \frac{\gamma}{\sigma}, \\ P_{N_1} &= \frac{\pi^2 N_B Pe}{\varepsilon L_b \Gamma_N}, \quad P_{N_2} = 1 + \frac{\varepsilon P_{N_1}}{\Gamma_T L_e} \left( 1 - 2N_A + \frac{N_A}{\Gamma_\phi}(\pi^2 + a^2) \right), \\ \Gamma_B &= \frac{Pr}{Pm}(\pi^2 + a^2) + \frac{\gamma}{\sigma}, \quad \Gamma_\alpha = PeG((1 + \alpha_0)\pi^2 + (1 - \alpha_0)a^2). \end{aligned}$$

For most nanofluids, the quantities  $Pe\frac{N_B}{L_e}, Pe\frac{N_B}{\varepsilon}$  are small ( $N_B = 7.5 \cdot 10^{-4}$ ,  $L_e = 5000$  see, for example, [5]), and expression (38) becomes simpler

$$Ra = \frac{(\pi^2 + a^2)\Gamma_D\Gamma_T}{a^2} + \frac{QPr}{\varepsilon Pm} \frac{\Gamma_T}{a^2\Gamma_B} \pi^2(\pi^2 + a^2) - \frac{R_n}{\Gamma_\phi} \left( \frac{L_e}{\varepsilon} \Gamma_T + N_A(\pi^2 + a^2) \right) - \frac{\left( \frac{R_b}{L_b} \right) \Gamma_\alpha \Gamma_T}{\Gamma_N} \quad (39)$$

In the equation (39) the growth rate  $\gamma$  of perturbations is generally complex  $\gamma = \gamma_r + i\omega_i$ . It is obvious that the system is stable if  $\gamma_r < 0$  and unstable if  $\gamma_r > 0$ . Let us determine the stability boundary for monotonic  $\omega_i = 0$  and oscillatory  $\omega_i \neq 0$  perturbations. At the stability boundary (neutral states),  $\gamma_r = 0$ ; therefore, making the substitution  $\gamma = i\omega_i$  in Eq. (39), we find

$$Ra = Ra^{(r)} + i\omega_i Ra^{(i)}, \quad (40)$$

where  $Ra^{(r)}$  and  $Ra^{(i)}$  are the real and imaginary parts of the dispersion equation for  $Ra$  :

$$\begin{aligned} Ra^{(r)} = & \frac{(\pi^2 + a^2)}{a^2} \left( (D_a(\pi^2 + a^2) + 1)(\pi^2 + a^2) - \omega_i^2 \mathcal{V}_a^{-1} \right) + \frac{QPr}{\varepsilon Pm} \frac{\pi^2(\pi^2 + a^2)}{a^2} \cdot \frac{\frac{Pr}{Pm}(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2}{\tilde{\sigma}}}{\frac{Pr^2}{Pm^2}(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2}{\tilde{\sigma}^2}} - \\ & - \frac{R_n}{(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2 L_e^2}{\tilde{\sigma}^2}} \left( \frac{L_e}{\varepsilon} \left( (\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2 L_e}{\tilde{\sigma}} \right) + N_A(\pi^2 + a^2)^2 \right) - \\ & - Ra_B (\pi^2 + a^2 + \alpha_0(\pi^2 - a^2)) \cdot \frac{(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2 L_b}{\tilde{\sigma}}}{(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2 L_b^2}{\tilde{\sigma}^2}} \end{aligned} \quad (41)$$

where  $Ra_B = R_b PeG$  is the modified bioconvection Rayleigh-Darcy number.

$$\begin{aligned} Ra^{(i)} = & \frac{(\pi^2 + a^2)}{a^2} (D_a(\pi^2 + a^2) + 1 + \mathcal{V}_a^{-1}(\pi^2 + a^2)) + \frac{QPr}{\varepsilon Pm} \frac{\pi^2(\pi^2 + a^2)^2}{a^2} \cdot \frac{\frac{\tilde{\sigma}Pr - Pm}{\tilde{\sigma}Pm}}{\frac{Pr^2}{Pm^2}(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2}{\tilde{\sigma}^2}} - \\ & - \frac{R_n L_e (\pi^2 + a^2)}{(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2 L_e^2}{\tilde{\sigma}^2}} \left( \frac{\tilde{\sigma}(\tilde{\sigma} - L_e) - \varepsilon N_A}{\varepsilon \tilde{\sigma}} \right) - \frac{Ra_B (\pi^2 + a^2 + \alpha_0(\pi^2 - a^2))}{(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2 L_b^2}{\tilde{\sigma}^2}} \left( \frac{\tilde{\sigma} - L_b}{\tilde{\sigma} L_b} \right) \end{aligned} \quad (42)$$

Since the value  $Ra$  is real, then the imaginary part in (40) must vanish. In this case, the following situation  $\omega_i = 0$  or  $Ra^{(i)} = 0$  is possible.

#### 4.1. Oscillating convection regime

In the case of an oscillatory perturbation  $\omega_i \neq 0$  ( $Ra^{(i)} = 0$ ), we find the critical Rayleigh-Darcy number for oscillatory instability using the formula (41)

$$\begin{aligned} Ra_{osc} = & \frac{(\pi^2 + a^2)}{a^2} \left( (D_a(\pi^2 + a^2) + 1)(\pi^2 + a^2) - \omega_i^2 \mathcal{V}_a^{-1} \right) + \frac{QPr}{\varepsilon Pm} \frac{\pi^2(\pi^2 + a^2)}{a^2} \cdot \frac{\frac{Pr}{Pm}(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2}{\tilde{\sigma}}}{\frac{Pr^2}{Pm^2}(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2}{\tilde{\sigma}^2}} - \\ & - \frac{R_n}{(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2 L_e^2}{\tilde{\sigma}^2}} \left( \frac{L_e}{\varepsilon} \left( (\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2 L_e}{\tilde{\sigma}} \right) + N_A(\pi^2 + a^2)^2 \right) - Ra_B (\pi^2 + a^2 + \alpha_0(\pi^2 - a^2)) \cdot \frac{(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2 L_b}{\tilde{\sigma}}}{(\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\omega_i^2 L_b^2}{\tilde{\sigma}^2}} \end{aligned} \quad (43)$$

and the frequency of neutral oscillations  $\omega = \omega_i$ , satisfying the following equation:

$$\kappa_0 \left( \frac{\omega}{\sigma} \right)^6 + \kappa_1 \left( \frac{\omega}{\sigma} \right)^4 + \kappa_2 \left( \frac{\omega}{\sigma} \right)^2 + \kappa_3 = 0, \tag{44}$$

where the following notation has been introduced:

$$\begin{aligned} \kappa_0 &= q \cdot L_e^2 L_b^2, \quad p = \frac{(\pi^2 + a^2)}{a^2} ((\pi^2 + a^2)(D_a + \mathcal{V}_a^{-1}) + 1), \\ \kappa_1 &= p(\pi^2 + a^2)^2 \left( L_e^2 + L_b^2 + \frac{Pr^2}{Pm^2} L_e^2 L_b^2 \right) + q L_e^2 L_b^2 - (r_n L_b^2 + r_B L_e^2), \quad q = \frac{QPr}{\varepsilon Pm} \frac{\pi^2 (\pi^2 + a^2)^2}{a^2} \frac{\tilde{\sigma} Pr - Pm}{\tilde{\sigma} Pm}, \\ r_n &= \frac{R_n (\pi^2 + a^2) L_e}{\varepsilon \tilde{\sigma}} (\tilde{\sigma} (\tilde{\sigma} - L_e) - \varepsilon N_A), \quad r_B = \frac{Ra_B (\tilde{\sigma} - L_b)}{\tilde{\sigma} L_b} (\pi^2 + a^2 + \alpha_0 (\pi^2 - a^2)), \\ \kappa_2 &= p(\pi^2 + a^2)^4 \left( 1 + \frac{Pr^2}{Pm^2} (L_e^2 + L_b^2) \right) + q(\pi^2 + a^2)^2 (L_e^2 + L_b^2) - \\ &\quad - (\pi^2 + a^2)^2 \left( r_n \left( 1 + \frac{Pr^2}{Pm^2} L_b^2 \right) + r_B \left( 1 + \frac{Pr^2}{Pm^2} L_e^2 \right) \right) \\ \kappa_3 &= p(\pi^2 + a^2)^5 \frac{Pr^2}{Pm^2} + q(\pi^2 + a^2)^4 - \frac{Pr^2}{Pm^2} (\pi^2 + a^2)^4 (r_n + r_B). \end{aligned}$$

Equation (44) is cubic in  $\omega^2$ , so it can lead to more than one positive value of  $\omega^2$  for fixed values of the parameters  $D_a, \mathcal{V}_a, Q, Pr, Pm, \tilde{\sigma}, R_n, L_e, N_A, L_b, Ra_B$  and  $\alpha_0$ . If there are no positive solutions to Eq. (44), then oscillatory instability is impossible. Our numerical solution of Eq. (44) for the range of parameters considered here gives only a negative value of  $\omega^2$ , which indicates the impossibility of an oscillatory neutral solution. As a result, we'll go through the stationary convection regime in significant detail.

#### 4.2. Stationary convection regime

The marginal state will be characterized by  $\omega_i = 0$ , and the dispersion relation (41) reduces to

$$\begin{aligned} Ra_{st} &= \frac{1}{a^2} \left( D_a (\pi^2 + a^2)^3 + (\pi^2 + a^2)^2 + \frac{\pi^2 Q}{\varepsilon} (\pi^2 + a^2) \right) - \\ &\quad - R_n \left( \frac{L_e}{\varepsilon} + N_A \right) - R_b PeG \left( \pi^2 + a^2 + \alpha_0 (\pi^2 - a^2) \right) \end{aligned} \tag{45}$$

The last term in (45) describes a new effect of the influence of the motion of gyrotactic microorganisms on thermal instability. Thus, we have obtained a new way to control magnetic convection in a porous medium saturated with nanofluid using bioconvection of gyrotactic microorganisms.

Let us now continue to a more exhaustive analysis of the equation (45). The critical wave numbers for the onset of convection are found from the condition

$$\left( \frac{\partial Ra_{st}}{\partial a} \right)_{a=a_{cr}} = 0 \tag{46}$$

We get an equation for determining  $a_{cr}$  by substituting the expression (45) into the condition (46). This equation has a rather cumbersome form, so we do not present it here. However, we can conclude that the critical wave number  $a_{cr}$  does not depend on the nanofluid parameters  $(R_n, L_e, N_A)$ , but depends on the dimensionless parameters  $\varepsilon, D_a, Q, R_b, Pe, G, \alpha_0$ . We will be doing a numerical study of the dispersion equation (45) using the physical characteristics of the  $Al_2O_3$ -water nanofluid from [5]:

$$\phi_0 = 0.001, \quad \rho_f = 1000 \text{ kg} / \text{m}^3, \quad \mu = 10^{-3} \text{ Pas}, \tag{47}$$



$$\rho_d = 4 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3, \alpha_m = 2 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}, \beta = 3.4 \cdot 10^{-3} \text{ 1/K},$$

$$D_B = 4 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}, D_T = 6 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s},$$

$$(\rho c)_p = 3.1 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3, (\rho c)_f = 4 \cdot 10^6 \text{ J/m}^3,$$

$$T_d - T_u = 1\text{K}, T_u = 300\text{K}, L_e = 5000, \rho_p = 4 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3.$$

The above-mentioned parameter values give the following dimensionless parameter values:  $L_e = 5000, Pr = 5$ , and  $N_A = 5$ . The concentration Rayleigh-Darcy and bioconvection Rayleigh-Darcy numbers can be changed by varying the distance between the borders and the nanoparticle and microorganisms volumetric concentration. For a complete numerical analysis, we need the estimated parameters of gyrotactic microorganisms, for example, for the alga *Chlamydomonas nivalis* [20]:

$$D_m = 5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}, N_0 = 10^6 \text{ cm}^{-3}, (\delta\rho)/\rho_0 = 5 \cdot 10^{-2}, \quad (48)$$

$$\mathcal{V} = 5 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3, W_c = 10^{-2} \text{ cm/s}.$$

Next, we will fix the value for the parameter  $R_n$  as  $R_n = 0.122$  and  $R_b$  as  $R_b = 1.2 \cdot 10^5$ . The values of the parameters  $Pe$  and  $G$  change in the neighborhood of  $Pe = 0.1$  and  $G = 0.01$  [34]. The cell eccentricity can change in the range  $\alpha_0 \in [0,1]$  [20].

In addition, we will be doing a numerical study of the dispersion equation (45) using the physical characteristics of nanofluids from metallic and semiconductor nanoparticles. Yang et al. [42] found that the physical characteristics of nanofluids change with the form, size, and volumetric percentage of nanoparticles. Metallic nanofluids, as the name implies, are metallic nanoparticles dispersed in a base fluid. Because metallic nanoparticles have a high thermal conductivity, they increase the thermal conductivity of nanofluids. We consider nanoparticles of metals (*Cu* and *Ag*) dispersed in the base fluid water for analyzing the stability of metallic nanofluids. For *Cu*-water nanofluid, the values of nanofluid parameters at  $\delta\phi = \phi_u - \phi_d = 0.001$  (nanoparticle concentration) are  $R_n = 0.392, N_A = 0.5, L_e = 5000$ , and for *Ag*-water nanofluid:  $R_n = 0.465, N_A = 0.5, L_e = 5000$  [16]. The electrical conductivity of semiconductor materials is approximately between a conductor and an insulator. At  $\delta\phi = 0.001$  (nanoparticle concentration), the values of nanofluid parameters are  $R_n = 0.159, N_A = 20, L_e = 5000$  for *TiO<sub>2</sub>*-water nanofluid and  $R_n = 0.0785, N_A = 17.5, L_e = 5000$  for *SiO<sub>2</sub>*-water nanofluid [16].

## 5. WEAK NONLINEAR STABILITY ANALYSIS

We explored linear stability analysis using the normal mode method in the previous section. Although linear stability analysis is appropriate for studying the stability condition of the motionless solution describing convective flow. However, this approach cannot offer information regarding convection amplitudes and hence heat and mass transfer rates. In this section, we consider the situation of two-dimensional rolls, assuming that all physical variables are independent of  $y$ . In this case, Eqs. (1) and (7) for velocity and magnetic field perturbations will take the form

$$\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial w'}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial b'_x}{\partial x} + \frac{\partial b'_z}{\partial z} = 0. \quad (49)$$

We may introduce two scalar functions using Eq. (49), the hydrodynamic function of the current  $\Psi$  and the magnetic function  $\Phi$ , for which the following relationships hold:

$$u' = \frac{\partial \Psi}{\partial z}, \quad w' = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}, \quad b'_x = \frac{\partial \Phi}{\partial z}, \quad b'_z = -\frac{\partial \Phi}{\partial x}. \quad (50)$$

Then equations (2)-(6) for the perturbed quantities, taking into account nonlinear effects, take the following form for dimensionless variables

$$\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{1}{L_e} \nabla_1^2 \phi' + \frac{N_A}{L_e} \nabla_1^2 T' = \frac{1}{\sigma} \frac{\partial \phi'}{\partial t} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial (\Psi, \phi')}{\partial (x, z)}, \quad (51)$$

$$\frac{1}{L_b} \nabla_1^2 N' - \frac{Pe}{L_b} \frac{\partial N'}{\partial z} - PeG \frac{\partial \zeta}{\partial x} = \frac{1}{\sigma} \frac{\partial N'}{\partial t} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial(\psi, N')}{\partial(x, z)} + PeG \zeta \frac{\partial N'}{\partial x} + PeGN' \frac{\partial \zeta}{\partial x} \tag{52}$$

$$\nabla_1^2 \psi - D_a \nabla_1^4 \psi + Ra \frac{\partial T'}{\partial x} - R_n \frac{\partial \phi'}{\partial x} - \frac{R_b}{L_b} \frac{\partial N'}{\partial x} - \frac{QPr}{Pm} \frac{\partial}{\partial z} \nabla_1^2 \Phi = -\frac{1}{\nu_a} \frac{\partial}{\partial t} \nabla_1^2 \psi - \frac{QPr}{Pm} \frac{\partial(\Phi, \nabla_1^2 \Phi)}{\partial(x, z)} \tag{53}$$

$$\begin{aligned} \nabla_1^2 T' + \frac{N_B}{L_e} \left( \frac{\partial T'}{\partial z} - \frac{\partial \phi'}{\partial z} \right) - \frac{2N_A N_B}{L_e} \frac{\partial T'}{\partial z} - \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial T'}{\partial t} - \frac{\partial(\psi, T')}{\partial(x, z)} - \frac{N_B}{L_e} \left( \frac{\partial \phi'}{\partial x} \frac{\partial T'}{\partial x} + \frac{\partial \phi'}{\partial z} \frac{\partial T'}{\partial z} \right) - \\ - \frac{N_A N_B}{L_e} \left[ \left( \frac{\partial T'}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial T'}{\partial z} \right)^2 \right], \end{aligned} \tag{54}$$

$$\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{Pr}{Pm} \nabla_1^2 \Phi = \frac{1}{\sigma} \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial(\psi, \Phi)}{\partial(x, z)}, \tag{55}$$

where

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad \zeta = \nabla_1^2 \psi + \alpha_0 \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right).$$

The boundary conditions considered for solving the given system of equations (51)-(55) are

$$\psi = D^2 \psi = \Phi = D\Phi = \phi' = N' = T' = 0, \quad \text{at } z = (0, 1) \tag{56}$$

We use the following Fourier expressions to perform a local nonlinear stability analysis:

$$\begin{aligned} \psi(x, z, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} A_{mn}(t) \sin(mkx) \sin(n\pi z), \\ \Phi(x, z, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} B_{mn}(t) \sin(mkx) \cos(n\pi z), \\ \phi'(x, z, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} C_{mn}(t) \cos(mkx) \sin(n\pi z), \\ N'(x, z, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} D_{mn}(t) \cos(mkx) \sin(n\pi z), \\ T'(x, z, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} E_{mn}(t) \cos(mkx) \sin(n\pi z). \end{aligned} \tag{57}$$

We limit our research with the Fourier analysis of the minimum order, namely, for the current function  $\psi$  and magnetic potential  $\Phi$  we take the modes (1,1), and (1,1)+(0,2) for nanoparticle volume fraction, concentration of microorganisms (or cells), and temperature perturbations:

$$\begin{aligned} \psi &= A_{11}(t) \sin(kx) \sin(\pi z), \\ \Phi &= B_{11}(t) \sin(kx) \cos(\pi z), \\ \phi' &= C_{11}(t) \cos(kx) \sin(\pi z) + C_{02}(t) \sin(2\pi z), \\ N' &= D_{11}(t) \cos(kx) \sin(\pi z) + D_{02}(t) \sin(2\pi z), \\ T' &= E_{11}(t) \cos(kx) \sin(\pi z) + E_{02}(t) \sin(2\pi z). \end{aligned} \tag{58}$$

The minimum order Fourier expansion was first used by Lorentz to model atmospheric convection [23]. The system of ordinary differential equations obtained by Lorentz is a low-order spectral model, but it is quite capable of qualitatively reproducing convective processes, in particular, the transition to a weakly turbulent state (chaos) through a series of bifurcations. In this study, we also use the Lorentz approach in describing the weakly nonlinear stage of convective instability. However, we do not touch upon issues related to the chaotic behavior of the obtained system of ordinary differential equations (51)-(55) since it requires a particular study. So we apply the weakly nonlinear theory

[43]-[45] to the problem of determining the characteristics of heat and mass transfer: nonstationary Nusselt  $Nu(t)$  and Sherwood  $Sh(t)$  numbers.

Substituting (58) in (51)-(55) and taking into account the orthogonality condition, we get the evolution equations for amplitudes:

$$\frac{\partial A_{11}}{\partial t} = -\mathcal{V}_a(1 + D_a(k^2 + \pi^2))A_{11} - \frac{kRa\mathcal{V}_a}{k^2 + \pi^2}E_{11} + \frac{kR_n\mathcal{V}_a}{k^2 + \pi^2}C_{11} + \frac{kR_b\mathcal{V}_a}{L_b(k^2 + \pi^2)}D_{11} - \frac{\pi QPr\mathcal{V}_a}{Pm}B_{11}, \quad (59)$$

$$\frac{\partial B_{11}}{\partial t} = -\tilde{\sigma}(k^2 + \pi^2)\frac{Pr}{Pm}B_{11} + \frac{\pi\tilde{\sigma}}{\varepsilon}A_{11}, \quad (60)$$

$$\frac{\partial C_{11}}{\partial t} = -\frac{\tilde{\sigma}}{L_e}(k^2 + \pi^2)C_{11} - \frac{N_A}{L_e}\tilde{\sigma}(k^2 + \pi^2)E_{11} + \frac{k\tilde{\sigma}}{\varepsilon}A_{11} - \frac{k\pi\tilde{\sigma}}{\varepsilon}A_{11}C_{02}, \quad (61)$$

$$\frac{\partial C_{02}}{\partial t} = -\frac{4\pi^2\tilde{\sigma}}{L_e}C_{02} - \frac{N_A}{L_e}4\pi^2\tilde{\sigma}E_{02} + \frac{k\pi\tilde{\sigma}}{2\varepsilon}A_{11}C_{11}, \quad (62)$$

$$\frac{\partial D_{11}}{\partial t} = -\frac{\tilde{\sigma}}{L_b}(k^2 + \pi^2)D_{11} - \frac{k\pi\tilde{\sigma}}{\varepsilon}A_{11}D_{02} + PeG\tilde{\sigma}k(k^2 + \pi^2 + \alpha_0(\pi^2 - k^2))A_{11}, \quad (63)$$

$$\frac{\partial D_{02}}{\partial t} = -\frac{4\pi^2\tilde{\sigma}}{L_b}D_{02} + \frac{k\pi\tilde{\sigma}}{2\varepsilon}A_{11}D_{11}, \quad (64)$$

$$\frac{\partial E_{11}}{\partial t} = -(k^2 + \pi^2)E_{11} - kA_{11} - \pi kA_{11}E_{02}, \quad (65)$$

$$\frac{\partial E_{02}}{\partial t} = -4\pi^2E_{02} + \frac{k\pi}{2}A_{11}E_{11}. \quad (66)$$

In phase space, the eight-mode differential Eqs. (59)-(66) have an interesting property that indicates that the system is dissipative:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \dot{A}_{11}}{\partial A_{11}} + \frac{\partial \dot{B}_{11}}{\partial B_{11}} + \frac{\partial \dot{C}_{11}}{\partial C_{11}} + \frac{\partial \dot{C}_{02}}{\partial C_{02}} + \frac{\partial \dot{D}_{11}}{\partial D_{11}} + \frac{\partial \dot{D}_{02}}{\partial D_{02}} + \frac{\partial \dot{E}_{11}}{\partial E_{11}} + \frac{\partial \dot{E}_{02}}{\partial E_{02}} = \\ & = -\mathcal{V}_a(1 + D_a(k^2 + \pi^2)) - \tilde{\sigma}(k^2 + \pi^2)\left(\frac{Pr}{Pm} + \frac{1}{L_e} + \frac{1}{L_b}\right) - 4\pi^2\tilde{\sigma}\left(\frac{1}{L_e} + \frac{1}{L_b}\right) - (k^2 + \pi^2) - 4\pi^2 < 0 \end{aligned} \quad (67)$$

As a result, the impact of parameters  $R_n, R_b, L_e, N_A, L_b, \mathcal{V}_a$  on trajectories is to attract them to a set of measures zero, or a fixed point. For the time-dependent variables, the nonlinear system of differential equations cannot be solved analytically and must be solved numerically. In the case of steady motions, Eqs. (59)-(66) become:

$$\begin{aligned} A_{11} &= \frac{1}{1 + D_a(k^2 + \pi^2)} \left[ -\frac{kRa}{k^2 + \pi^2}E_{11} + \frac{kR_n}{k^2 + \pi^2}C_{11} + \frac{kR_b}{L_b(k^2 + \pi^2)}D_{11} - \frac{\pi QPr}{Pm}B_{11} \right], \\ B_{11} &= \frac{\pi Pm}{Pr(k^2 + \pi^2)}A_{11}, \quad C_{11} = -N_A E_{11} + \frac{kL_e}{\varepsilon(k^2 + \pi^2)}A_{11} - \frac{k\pi L_e}{\varepsilon(k^2 + \pi^2)}A_{11}C_{02}, \\ C_{02} &= -N_A E_{02} + \frac{kL_e}{8\pi\varepsilon}A_{11}C_{11}, \quad D_{11} = -\frac{k\pi L_b}{\varepsilon(k^2 + \pi^2)}A_{11}D_{02} + \frac{kPeGL_b}{k^2 + \pi^2}(k^2 + \pi^2 + \alpha_0(\pi^2 - k^2))A_{11}, \\ D_{02} &= \frac{kL_b}{8\pi\varepsilon}A_{11}D_{11}, \quad E_{11} = -\frac{k}{k^2 + \pi^2}A_{11} - \frac{k\pi}{k^2 + \pi^2}A_{11}E_{02}, \quad E_{02} = \frac{k}{8\pi}A_{11}E_{11}. \end{aligned} \quad (68)$$

The steady state solutions are useful because they indicate that the system can have a finite amplitude solution. When all amplitudes except  $A_{11}$  are eliminated, an equation with  $A_{11}^2/8$  is obtained:

$$\left(\frac{A_{11}^2}{8}\right)^3 + \beta_1\left(\frac{A_{11}^2}{8}\right)^2 + \beta_2\left(\frac{A_{11}^2}{8}\right) + \beta_3 = 0, \quad (69)$$

where

$$\beta_1 = \frac{L_e^2 + L_b^2}{k_1^2 L_e^2 L_b^2} + \frac{1}{k_0^2} - \frac{Ra}{k_0^2 M} - \frac{R_n \left( \frac{1}{\varepsilon} - N_A \right)}{k_1^2 L_e M} - \frac{Ra_B \left( k^2 + \pi^2 + \alpha_0 (\pi^2 - k^2) \right)}{k_1^2 L_b^2 M},$$

$$M = \frac{(1 + D_a (k^2 + \pi^2)) (k^2 + \pi^2)^2}{k^2} + \frac{\pi^2 Q (k^2 + \pi^2)}{\varepsilon k^2}, \quad k_0 = \frac{k^2}{k^2 + \pi^2}, \quad k_1 = \frac{k^2}{\varepsilon^2 (k^2 + \pi^2)},$$

$$\beta_2 = \frac{k_0^2 + k_1^2 (L_e^2 + L_b^2)}{k_0^2 k_1^4 L_e^2 L_b^2} - \frac{Ra (L_e^2 + L_b^2)}{k_0^2 k_1^2 L_e^2 L_b^2 M} - \frac{R_n \left( \frac{L_e}{\varepsilon} + N_A \right)}{k_0^2 k_1^2 L_e^2 M} -$$

$$\frac{R_n \left( \frac{1}{\varepsilon} - N_A \right)}{k_1^4 L_e^2 L_b^2 M} - \frac{Ra_B \left( k^2 + \pi^2 + \alpha_0 (\pi^2 - k^2) \right)}{k_0^2 k_1^4 L_e^2 L_b^2 M} (k_0^2 + k_1^2 L_e^2), \quad \beta_3 = \frac{Ra_{st} - Ra}{k_0^2 k_1^4 L_e^2 L_b^2 M}.$$

In the limit of small amplitudes ( $A_{11} \rightarrow 0$ ), Eq. (69) transforms into dispersion equation (45) for the stationary convection regime when the wave number  $a$  is replaced by  $k$ . It should be noted that the amplitude of the stream function must be real, hence we must only consider positive signs in the roots of Eq. (69). If we determine the value of  $A_{11}$ , we can find the value of heat and mass transfer in a stationary regime.

## 6. RESULTS AND DISCUSSIONS

### 6.1. Analysis of the linear regime of stationary convection

Now, we will study the effects of axial magnetic field, Darcy number, medium porosity, Lewis number, modified diffusivity ratio, concentration Rayleigh-Darcy number, modified bioconvection Rayleigh-Darcy number  $Ra_B = R_b PeG$ , and the cell eccentricity on thermal instability. We calculate the derivatives

$$\frac{dRa_{st}}{dQ}, \frac{dRa_{st}}{dD_a}, \frac{dRa_{st}}{d\varepsilon}, \frac{dRa_{st}}{dL_e}, \frac{dRa_{st}}{dN_A}, \frac{dRa_{st}}{dR_n}, \frac{dRa_{st}}{dRa_B}, \frac{dRa_{st}}{d\alpha_0},$$

using Eq. (45), as a result we obtain

$$\frac{dRa_{st}}{dQ} = \frac{\pi^2 (\pi^2 + a^2)}{\varepsilon a^2}, \tag{70}$$

$$\frac{dRa_{st}}{dD_a} = \frac{(\pi^2 + a^2)^3}{a^2}, \tag{71}$$

$$\frac{dRa_{st}}{d\varepsilon} = \frac{R_n N_A L_e}{\varepsilon^2} - \frac{\pi^2 (\pi^2 + a^2) Q}{\varepsilon^2 a^2}, \tag{72}$$

$$\frac{dRa_{st}}{dL_e} = -\frac{R_n}{\varepsilon}, \quad \frac{dRa_{st}}{dN_A} = -R_n, \quad \frac{dRa_{st}}{dR_n} = -\left( \frac{L_e}{\varepsilon} + N_A \right). \tag{73}$$

Eq. (70) shows that the derivative  $dRa_{st} / dQ$  is always positive, i.e. the vertical magnetic field has a stabilizing effect on stationary convection in the porous medium. As a consequence, it is discovered that increasing the magnetic field delays the initiation of convection, which is agreement with the results derived by Ahuja et al. [13].

Eq. (71) implies that the Darcy number has a stabilizing influence on the stationary convection of the system, which is in a good agreement with the results derived by Kuznetsov and Nield [7], Rana and Chand [11], Ahuja et al. [13]. With an increase in Darcy number,  $Ra_{st}$  increases, indicating that the heat transmission characteristics of the nanofluid will improve. Therefore, the effect of the Darcy number, as well as the magnetic field, delays the onset of convection.

Eq. (72) shows that porosity can have both a stabilizing and destabilizing effect. If inequality

$$\frac{R_n N_A L_e}{\varepsilon^2} > \frac{\pi^2 (\pi^2 + a^2) Q}{\varepsilon^2 a^2}$$

is satisfied, then porosity delays the onset of convection. This conclusion is in good accord with Ahuja et al. [13] results.

The following conclusions may be drawn from Eq. (73). Because all of the parameters  $L_e, N_A$ , and  $R_n$  are positive for the current configuration of nanoparticles, and the expression  $R_n(L_e / \varepsilon + N_A)$  appears with a negative sign, it is obvious that the suspension of nanoparticles in ordinary fluids decreases the critical value of Rayleigh number. As a result, the system with nanoparticle distribution at the top of the fluid layer is less stable than the system with regular fluid and bottom heavy nanoparticle distribution.

Finally, we proceed to study the impact of gyrotactic microorganism bioconvection on magnetic convection. For this purpose, we calculate the following derivatives

$$\frac{dRa_{st}}{dRa_B} = - \left[ \pi^2 + a^2 + \alpha_0 (\pi^2 - a^2) \right], \quad (74)$$

$$\frac{dRa_{st}}{d\alpha_0} = -Ra_B (\pi^2 - a^2). \quad (75)$$

Eq. (74) shows that the spherical shape of microorganisms  $\alpha_0 = 0$  contributes has a destabilizing effect since

$$\frac{dRa_{st}}{dRa_B} = -(\pi^2 + a^2) < 0 \quad (76)$$

Thus, increasing the value of modified bioconvection Rayleigh-Darcy number  $Ra_B$  enhances the magnetic convection nanofluid in the layer of a porous medium. In the case of an arbitrary form of microorganisms, an increase in the parameter  $Ra_B$  can both stabilize (at  $\pi^2 + a^2 < \alpha_0(a^2 - \pi^2)$ ) and destabilize (at  $\pi^2 + a^2 > \alpha_0(a^2 - \pi^2)$ ) the thermal instability if  $\alpha_0$  is positive:  $\alpha_0 > 0$ .

Eq. (75) shows that  $dRa_{st} / d\alpha_0$  can be positive or negative, i.e. the cell (or microorganism) eccentricity has a stabilizing (if  $\pi^2 < a^2$ ) or destabilizing (if  $\pi^2 > a^2$ ) effect on stationary convection. This conclusion remains valid for positive  $Ra_B > 0$  numbers.

## 6.2. Heat and mass transports

The determination of heat and mass transport is critical in the study of fluid convection. This is because the onset of convection, when the Rayleigh number increases, is more easily observed through its influence on heat and mass transport. Consequently, heat and mass fluxes of nanoparticles are important in identifying thermal- and bioconvective motion in its early stages. Heat transfers can be calculated and described using the Nusselt number  $Nu(t)$  (see, for example [45])

$$Nu(t) = 1 + \left[ \frac{\int_0^{2\pi/k_{cr}} \frac{\partial T'}{\partial z} dx}{\int_0^{2\pi/k_{cr}} \frac{\partial T_b}{\partial z} dx} \right]_{z=0} \quad (77)$$

According to (22) and (57), we get from (77)

$$Nu(t) = 1 - 2\pi E_{02}(t) \quad (78)$$

Similarly, the Sherwood number for nanoparticle concentration  $Sh(t)$  is determined to be:

$$Sh(t) = 1 + \left[ \frac{\int_0^{2\pi/k_{cr}} \frac{\partial \phi'}{\partial z} dx}{\int_0^{2\pi/k_{cr}} \frac{\partial \phi_b}{\partial z} dx} \right]_{z=0} = 1 + 2\pi C_{02}(t) \quad (79)$$

In the next section, we will consider the numerical/graphical investigation of the equations (70)-(79) by considering the numerical values of various parameters of the system.

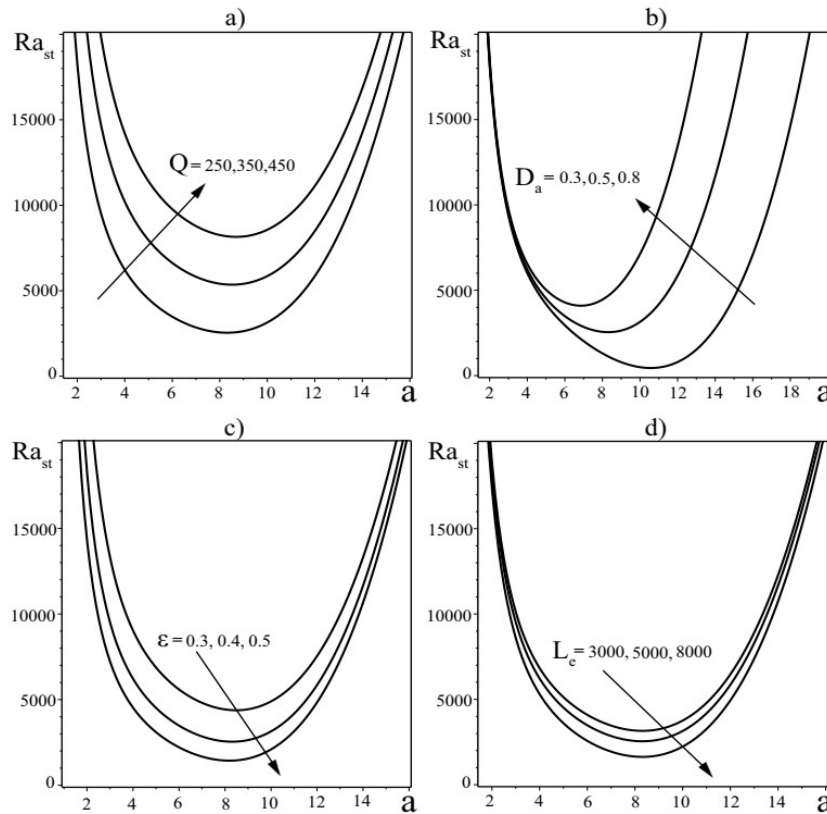
## 7. NUMERICAL RESULTS AND DISCUSSION

In this section, we use the standard Maple computer environment programs for the numerical analysis of equations (70)-(75) and (78)-(79). Nonlinear equations (59)-(66) were solved by the 4th-5th order Runge-Kutta-Felberg method (rkf45) with initial conditions:

$$A_{11}(0) = B_{11}(0) = C_{11}(0) = C_{02}(0) = D_{11}(0) = D_{02}(0) = E_{11}(0) = E_{02}(0) = 1.$$

**7.1. Stationary MHD bioconvection in  $Al_2O_3$ -water nanofluid**

Figures 2 and 3 depict the role of the magnetic field, Darcy parameter, porosity, Lewis number, modified diffusivity ratio, nanoparticles concentration Rayleigh number, modified bioconvection Rayleigh-Darcy number, and cell (or microorganism) eccentricity  $\alpha_0$  on Rayleigh number for metal oxide ( $Al_2O_3$ ) nanoparticles in water based nanofluid. The physical properties of aluminum-water nanofluids are given in (47).



**Figure 2.** Dependence of the Rayleigh number of stationary convection on the wavenumber  $a$  for parameter variations: (a) magnetic field (Chandrasekhar number)  $Q$ ; (b) Darcy number  $D_a$ ; (c) medium porosity  $\varepsilon$ ; (d) Lewis number  $L_e$

In Fig. 2a, the Rayleigh-Darcy number is plotted against the dimensionless wavenumber for different values of the axial magnetic field (Chandrasekhar number). This shows that as values of axial magnetic field increase, the Rayleigh-Darcy number also increases for fixed values

$$D_a = 0.5, \varepsilon = 0.4, L_e = 5000, N_A = 5, R_n = 0.122, Ra_B = 120, \alpha_0 = 0.4 .$$

As a consequence, the axial magnetic field can stabilize stationary convection, which is consistent with the analytical conclusion obtained from Eq. (70).

For different values of the Darcy number, the Rayleigh-Darcy number is displayed against the dimensionless wavenumber in Fig. 2b for fixed values

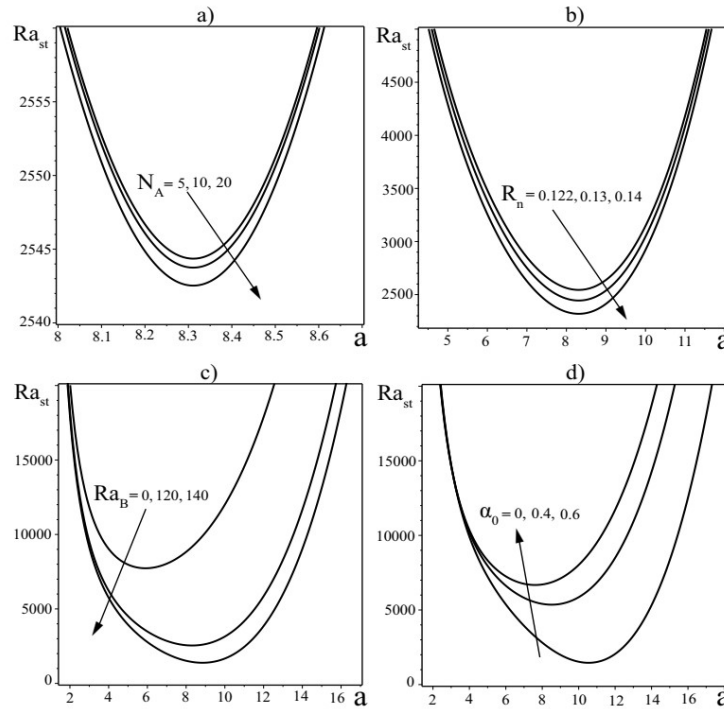
$$Q = 250, \varepsilon = 0.4, L_e = 5000, N_A = 5, R_n = 0.122, Ra_B = 120, \alpha_0 = 0.4 .$$

This demonstrates that when Darcy's number rises, so does the Rayleigh-Darcy number. As a result, the Darcy number has a stabilizing impact on stationary convection, which is in agreement with the analytical result obtained from Eq. (71).

For different values of medium porosity, the Rayleigh-Darcy number is plotted against dimensionless wavenumber in Fig. 2c for fixed values

$$D_a = 0.5, Q = 250, L_e = 5000, N_A = 5, R_n = 0.122, Ra_B = 120, \alpha_0 = 0.4 .$$

This shows that when porosity increases, the values of Rac decrease significantly. As a result, medium porosity has a destabilizing impact on stationary convection, which is consistent with the analytical result obtained from Eq. (72).



**Figure 3.** Dependence of the Rayleigh number of stationary convection on the wavenumber  $a$  for parameter variations: (a) modified diffusivity ratio  $N_A$ ; (b) concentration Rayleigh-Darcy number  $R_n$ ; (c) modified bioconvection Rayleigh-Darcy number  $Ra_B$ ; (d) cell eccentricity  $\alpha_0$

In Figs. 2d, 3a, 3b the Rayleigh-Darcy number is plotted against dimensionless wavenumber for different values of Lewis number, modified diffusivity ratio, and concentration Rayleigh number. These show that as Lewis number, modified diffusivity ratio, and concentration Rayleigh number increase, the Rayleigh-Darcy numbers decrease. Thus, the nanofluid parameters have a destabilizing effect on stationary convection, which is in good agreement with the result obtained analytically from Eqs. (73).

In Fig. 3c, the stationary Rayleigh-Darcy number  $Ra_{st}$  is plotted against dimensionless wave number  $a$  for different values of modified bioconvection Rayleigh-Darcy number  $Ra_B$  for fixed values  $D_a = 0.5, Q = 250, \varepsilon = 0.4, L_e = 5000, N_A = 5, R_n = 0.122, \alpha_0 = 0.4$ . Curve 1 depicts the dependency of the stationary Rayleigh-Darcy number on the wave number in the absence of the impact of microorganism bioconvection, i.e. when  $R_b = 0$ . A similar dependence also arises in the case when there is no gyrotax  $G = 0$  ( $Ra_B = 0$ ). The gyrotaxis number  $G$  characterizes the deviation of the cell's swimming direction from strictly vertical. If  $G = 0$ , there is no gyrotaxis and the microorganisms swim vertically upwards (show negative geotaxis). Pedley et al. [19] demonstrated that a suspension of gyrotactic microorganisms ( $G > 0$ ) is unstable under the same conditions. As a result, gyrotaxis plays a role in the emergence of bioconvection instability. As can be seen from Fig. 3c, with an increase in the parameter  $Ra_B$ , the threshold for the occurrence of magnetic convection decreases. This is because the movement of microorganisms leads to a redistribution of the density of the nanofluid, reducing the process of heat transfer in the nanofluid. As a consequence, the cell's swimming can destabilize stationary magnetoconvection, which is consistent with the analytical conclusion obtained from Eq. (74).

**Table 1.** Critical Rayleigh numbers  $Ra_{st}^{min}$  and critical wavenumbers  $k_{cr}$  for  $Al_2O_3$ -water nanofluid at fixed parameters  $R_n = 0.122$ ,  $N_A = 5$ ,  $L_e = 5000$

$Q$	$D_a$	$\varepsilon$	$Ra_B$	$\alpha_0$	$Ra_{st}^{min}$	$k_{cr}$
250	0.5	0.4	120	0.4	2544.36	8.31
350	0.5	0.4	120	0.4	5355.59	8.51
450	0.5	0.4	120	0.4	8151.92	8.69
250	0.3	0.4	120	0.4	445.25	10.57
250	0.5	0.4	120	0.4	2544.36	8.31
250	0.8	0.4	120	0.4	4095.58	6.86
250	0.5	0.3	120	0.4	4379.85	8.48
250	0.5	0.4	120	0.4	2544.36	8.31

$Q$	$D_a$	$\varepsilon$	$Ra_B$	$\alpha_0$	$Ra_{st}^{min}$	$k_{cr}$
250	0.5	0.5	120	0.4	1436.89	8.19
250	0.5	0.4	0	No	7730.31	5.90
250	0.5	0.4	120	0.4	2544.36	8.31
250	0.5	0.4	140	0.4	1384.94	8.85
350	0.5	0.4	120	0	1459.64	5.32
350	0.5	0.4	120	0.4	5355.59	8.51
350	0.5	0.4	120	0.6	6675.31	7.60

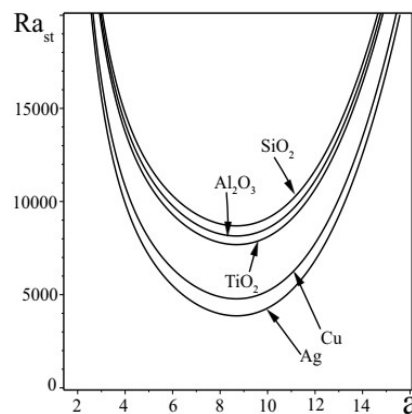
In Fig. 3d, the stationary Rayleigh-Darcy number  $Ra_{st}$  is plotted against dimensionless wave number  $a$  for different values of cell eccentricity  $\alpha_0$  for fixed values

$D_a = 0.5, Q = 350, \varepsilon = 0.4, L_e = 5000, N_A = 5, R_n = 0.122, Ra_B = 120$ . As can be seen from Fig. 3d, the spherical shape of microorganisms has a destabilizing effect on the beginning of magnetoconvection. This conclusion is confirmed by analytical results Eqs. (75) and (76).

The critical Rayleigh numbers  $Ra_{st}^{min}$  and the corresponding critical wavenumbers  $a_{cr}$  for different values of  $Q, D_a, \varepsilon, Ra_B$  and  $\alpha_0$  for  $Al_2O_3$ -water nanofluid are shown in Table 1. Let's notice that results in Table 1 were obtained numerically using (46) for  $Al_2O_3$ -water nanofluid and are in good agreement with the graphical results in Figs. 2a, 2b, 2c and Figs. 3c, 3d. In the limiting case when there are no microorganisms ( $Ra_B = 0$ ), the results from Table 1 are in good agreement with the results of paper [18].

### 7.2. Stationary MHD bioconvection in $Cu (Ag)$ -water and $TiO_2 (SiO_2)$ -water nanofluids

We now consider the graphical interpretation of numerical calculations for metallic nanofluids ( $Cu, Ag$ ) and semiconductors ( $TiO_2$  and  $SiO_2$ ). We investigate the impact of several nanofluids (metal, metal oxide, and semiconductor) on stationary convection by fixing the values of the parameters  $Da, \nu_a, Q, Pr, Pm, \tilde{\sigma}, Le, Lb, Ra_B$  and  $\alpha_0$ . The thermal Rayleigh-Darcy number  $Ra_{st}$  is plotted against the wavenumber for several nanofluids in Fig. 4. From Fig. 4, we can see that the  $SiO_2$ -water nanofluid exhibits the highest stability compared to  $Al_2O_3$ -water,  $TiO_2$ -water,  $Cu$ -water and  $Ag$ -water nanofluids. The phenomena for this behavior is not only the different density of nanoparticles but also different thermophysical properties. We can conclude that semiconductor and metal oxide nanoparticles have a more destabilizing effect on stationary convection than metallic nanoparticles.

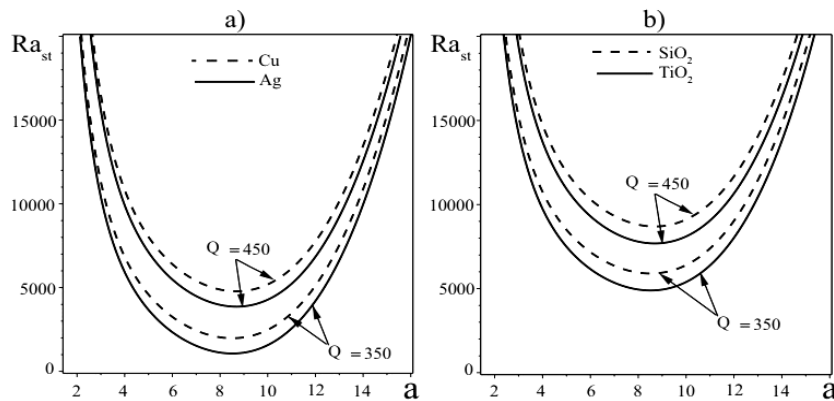


**Figure 4.** Dependence of the Rayleigh number of stationary convection on the wavenumber  $a$  for metal oxide ( $Al_2O_3$ ), metallic ( $Cu, Ag$ ), and semiconducting ( $TiO_2, SiO_2$ ) nanoparticles in water based nanofluids ( $D_a = 0.5, Q = 450, \varepsilon = 0.4, L_e = 5000, Ra_B = 120, \alpha_0 = 0.4$ )

Let us now consider the impact of different nanofluid parameters on the thermal instability of the system under the simultaneous influence of magnetic field. Figures 5a and 5b illustrate the impact of the Chandrasekhar number on the Rayleigh-Darcy number for metals ( $Cu, Ag$ ) and semiconductors ( $TiO_2, SiO_2$ ) in water-based nanofluids. These figures show that when the value of the Chandrasekhar parameter  $Q$  increases, the values of the thermal Rayleigh-Darcy number for both forms of convection increase, indicating that magnetic field has a stabilizing impact. The curves depicting the influence of Chandrasekhar number for  $Cu$ -water nanofluid are above those for  $Ag$ -water nanofluid, indicating that  $Cu$ -water nanofluid is more stable than  $Ag$ -water nanofluid. When the situation of semiconductors is considered

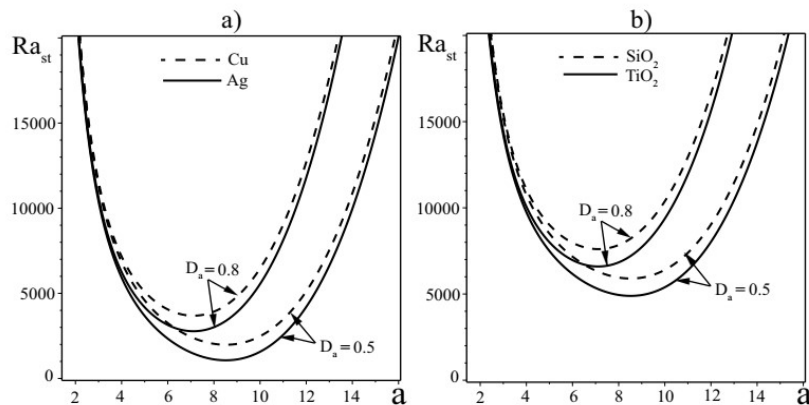


(Fig. 5b), it is found that  $SiO_2$ -nanoparticles improve the stability of nanofluid more than  $TiO_2$ -nanoparticles as the Chandrasekhar number increases. Thus, it is also interpreted from the figures that semiconductors inhibit the onset of convection as compared to metals under the influence of magnetic field.



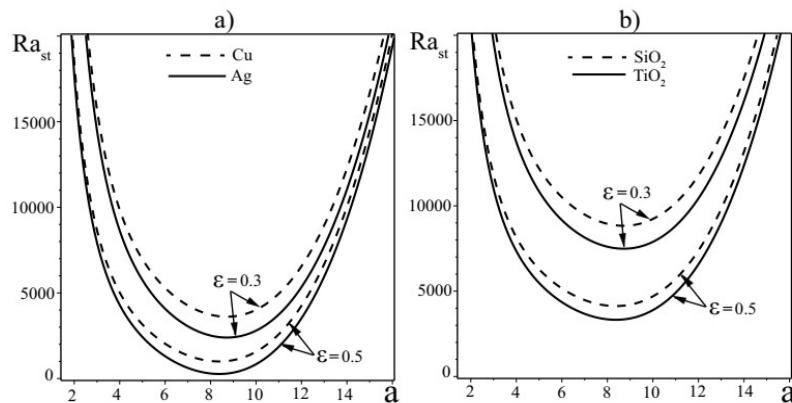
**Figure 5.** Impact of Chandrasekhar number  $Q$  on the stationary convective instability for different nanofluids: (a)  $Cu$  ( $Ag$ )-water; (b)  $TiO_2$  ( $SiO_2$ )-water ( $D_a = 0.5, \varepsilon = 0.4, L_e = 5000, Ra_B = 120, \alpha_0 = 0.4$ )

Figures 6a and 6b show the effect of Darcy number on the system. The value of  $Ra_{st}$  increases with the increase in Darcy's number and hence the Darcy number  $D_a$  delays the onset of instability. By increasing the Darcy number  $Cu$ -water and  $SiO_2$ -water nanofluids exhibit higher stability than  $Ag$ -water and  $TiO_2$ -water nanofluids.



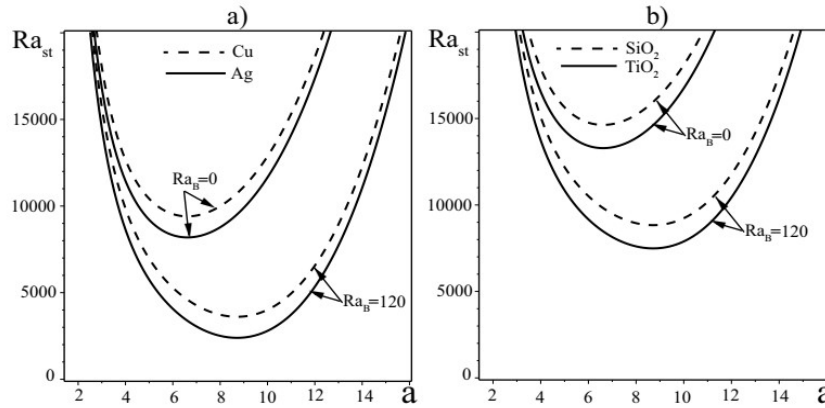
**Figure 6.** Impact of Darcy number  $D_a$  on the stationary convective instability for different nanofluids: (a)  $Cu$  ( $Ag$ )-water; (b)  $TiO_2$  ( $SiO_2$ )-water ( $Q = 350, \varepsilon = 0.4, L_e = 5000, Ra_B = 120, \alpha_0 = 0.4$ )

Further, let us study the influence of the effect of porosity on the system. Figures 7a and 7b show that the increase in  $\varepsilon$  porosity stimulates the onset of instability. The critical Rayleigh-Darcy numbers for nonmetallic nanofluids are higher than that for metallic nanofluids.



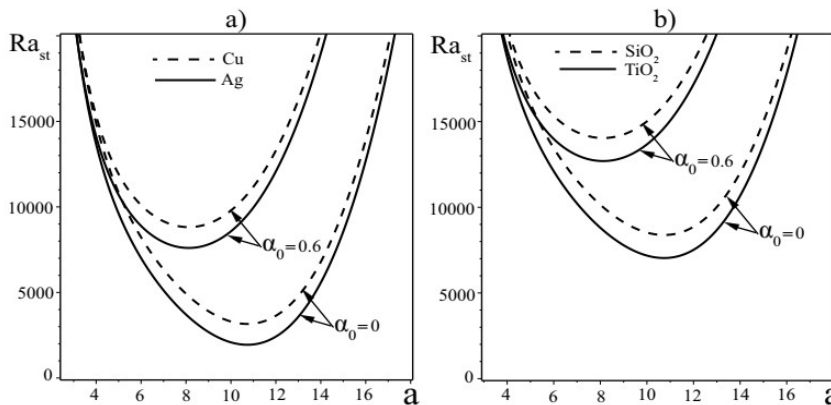
**Figure 7.** Impact of porosity  $\varepsilon$  on the stationary convective instability for different nanofluids: (a)  $Cu$  ( $Ag$ )-water; (b)  $TiO_2$  ( $SiO_2$ )-water ( $D_a = 0.5, Q = 350, L_e = 5000, Ra_B = 120, \alpha_0 = 0.4$ )

Figures 8a and 8b illustrate the impact of modified bioconvection Rayleigh-Darcy number  $Ra_b$  on the stationary convective instability for metallic and semiconductors nanofluids. We can observe that the cell's swimming can destabilize stationary magnetoconvection since the threshold for the occurrence of magnetic convection decreases when the parameter  $Ra_b$  is increased. As can be seen from Fig. 8 nonmetallic nanoparticles delay the onset of convection even in the absence of bioconvection  $Ra_b = 0$  (or movement of microorganisms).



**Figure 8.** Impact of modified bioconvection Rayleigh-Darcy number  $Ra_b$  on the stationary convective instability for different nanofluids: (a)  $Cu$  ( $Ag$ )-water; (b)  $TiO_2$  ( $SiO_2$ )-water ( $D_a = 0.5, Q = 350, \varepsilon = 0.3, L_e = 5000, \alpha_0 = 0.4$ )

Finally, let us study the influence of the effect of cell eccentricity  $\alpha_0$  on thermal stability. Figures 9a and 9b show that the spherical shape of microorganisms has a destabilizing effect on the beginning of magnetoconvection for metallic as for nonmetallic nanoparticles. However, nonmetallic nanoparticles still retard the development of stationary convection.



**Figure 9.** Impact of cell eccentricity  $\alpha_0$  on the stationary convective instability for different nanofluids: (a)  $Cu$  ( $Ag$ )-water; (b)  $TiO_2$  ( $SiO_2$ )-water ( $D_a = 0.5, Q = 450, \varepsilon = 0.3, L_e = 5000, Ra_b = 120$ ).

The critical Rayleigh numbers  $Ra_{st}^{min}$  and the corresponding critical wavenumbers  $a_{cr}$  for different values of  $Q, D_a, \varepsilon, Ra_b$  and  $\alpha_0$  for metallic nanofluids ( $Cu$ -water,  $Ag$ -water) are shown in Table 2. Take note that the results in Table 2 were derived numerically using (46) for metallic nanofluids ( $Cu$ -water,  $Ag$ -water) and correspond well with the graphical results in Figs. 5a, 6a, 7a, 8a, 9a.

**Table 2.** The critical Rayleigh numbers  $Ra_{st}^{min}$  and critical wavenumbers  $k_{cr}$  for metallic nanofluids ( $Cu$ -water,  $Ag$ -water) at fixed parameters  $L_e = 5000$ , a)  $R_n|_{Cu} = 0.392, N_A|_{Cu} = 0.5$ , b)  $R_n|_{Ag} = 0.465, N_A|_{Ag} = 0.5$

$Q$	$D_a$	$\varepsilon$	$Ra_b$	$\alpha_0$	a) $Ra_{st}^{min}$	a) $k_{cr}$	b) $Ra_{st}^{min}$	b) $k_{cr}$
350	0.5	0.4	120	0.4	1981.01	8.51	1068.47	8.51
450	0.5	0.4	120	0.4	4777.34	8.69	3864.80	8.69
350	0.5	0.4	120	0.4	1981.01	8.51	1068.47	8.51
350	0.8	0.4	120	0.4	3686.96	7.11	2774.42	7.11
350	0.5	0.3	120	0.4	3608.82	8.71	2392.12	8.71

$Q$	$D_a$	$\varepsilon$	$Ra_B$	$\alpha_0$	a) $Ra_{st}^{min}$	a) $k_{cr}$	b) $Ra_{st}^{min}$	b) $k_{cr}$
350	0.5	0.5	120	0.4	994.92	8.37	264.88	8.37
350	0.5	0.3	0	No	9406.12	6.61	8189.42	6.61
350	0.5	0.3	120	0.4	3608.82	8.71	2392.12	8.71
450	0.5	0.3	120	0	3157.93	10.73	1941.22	10.73
450	0.5	0.3	120	0.6	8817.45	8.12	7600.75	8.12

The critical Rayleigh numbers  $Ra_{st}^{min}$  and the corresponding critical wavenumbers  $a_{cr}$  for different values of  $Q, D_a, \varepsilon, Ra_B$  and  $\alpha_0$  for semiconductor nanofluids ( $TiO_2$ -water,  $SiO_2$ -water) are shown in Table 3. We notice that the numerical results in Table 3 for semiconductor nanofluids ( $TiO_2$ -water,  $SiO_2$ -water) agree well to the graphical results in Figs. 5b, 6b, 7b, 8b, 9b. In the limited case of no microorganisms ( $Ra_B = 0$ ), the results from Tables 2 and 3 agree well with the results of paper [13].

**Table 3.** The critical Rayleigh numbers  $Ra_{st}^{min}$  and critical wavenumbers  $k_{cr}$  for semiconductor nanofluids ( $TiO_2$ -water,  $SiO_2$ -water) at fixed parameters  $L_e = 5000$ , a)  $R_n|_{TiO_2} = 0.159, N_A|_{TiO_2} = 20$ , b)  $R_n|_{SiO_2} = 0.0785, N_A|_{SiO_2} = 17.5$

$Q$	$D_a$	$\varepsilon$	$Ra_B$	$\alpha_0$	a) $Ra_{st}^{min}$	a) $k_{cr}$	b) $Ra_{st}^{min}$	b) $k_{cr}$
350	0.5	0.4	120	0.4	4890.52	8.51	5898.58	8.51
450	0.5	0.4	120	0.4	7686.86	8.69	8694.91	8.69
350	0.5	0.4	120	0.4	4890.52	8.51	5898.58	8.51
350	0.8	0.4	120	0.4	6596.47	7.11	7604.53	7.11
350	0.5	0.3	120	0.4	7489.17	8.71	8832.65	8.71
350	0.5	0.5	120	0.4	3321.94	8.37	4128.75	8.37
350	0.5	0.3	0	No	13286.47	6.61	14629.94	6.61
350	0.5	0.3	120	0.4	7489.17	8.71	8832.64	8.71
450	0.5	0.3	120	0	7038.28	10.73	8381.75	10.73
450	0.5	0.3	120	0.6	12697.80	8.12	14041.28	8.12

It is noteworthy that copper-water nanofluid is more stable than silver-water nanofluid (refer to Figures 5a, 6a, 7a, 8a, 9a) and silicon oxide-water nanofluid is more stable than titanium oxide-water nanofluid (refer to Figures 5b, 6b, 7b, 8b, 9b). These conclusions are consistent with the results of paper [14].

### 7.3. The numerical/graphical results for Nusselt $Nu(t)$ and Sherwood $Sh(t)$ numbers

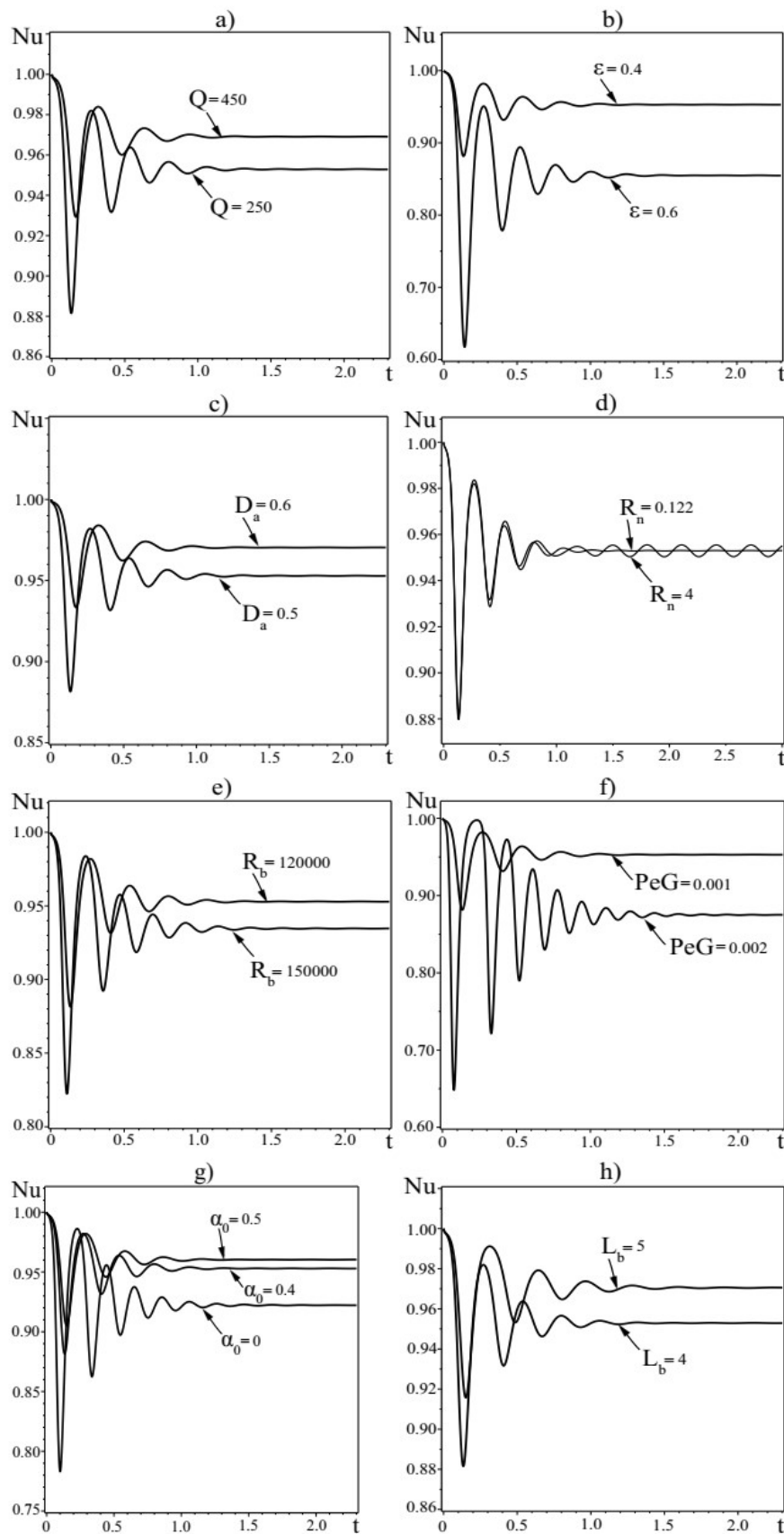
In general, the transition from linear to non-linear convection can be complex. The study of Eqs. (59)-(66), whose solution provides a full description of the two dimensional non-linear evolution issues, helps to understand the transition. The Runge-Kutta technique is used to solve the autonomous system of unstable finite-amplitude equations. Convective heat and mass transfers were calculated using Nusselt number  $Nu(t)$  and Sherwood number  $Sh(t)$ . The results are presented in Figures 10-12. It is assumed that the original value of the Nusselt and Sherwood number are equal to 1 at  $t = 0$ . These figures show that when time is short, oscillations in the values of the Nusselt and Sherwood numbers occur, indicating an unsteady rate of heat and mass transfer in the thermal convection system. These values approach a steady state, equivalent to a near convection stage, as time passes.

Figs. 10a-10h depict the temporary behavior of thermal Nusselt number  $Nu(t)$ , for varying values of magnetic field (Chandrasekhar number  $Q$ ), Darcy number  $D_a$ , nanoparticle concentration Rayleigh-Darcy number  $R_n$ , bioconvection Rayleigh-Darcy number  $R_b$ , modified gyrotaxis number  $PeG$ , geometric shape of microorganisms  $\alpha_0$  and bioconvection Lewis number  $L_b$ . It is observed that as  $Q, D_a, R_n, \alpha_0$  and  $L_b$  increase (see Figs. 10a, 10c, 10d, 10g and 10h), the values of  $Nu(t)$  show slightly incremented, thus showing an increase in the heat transport, which are the similar results obtained by Agarwal et al. [44].

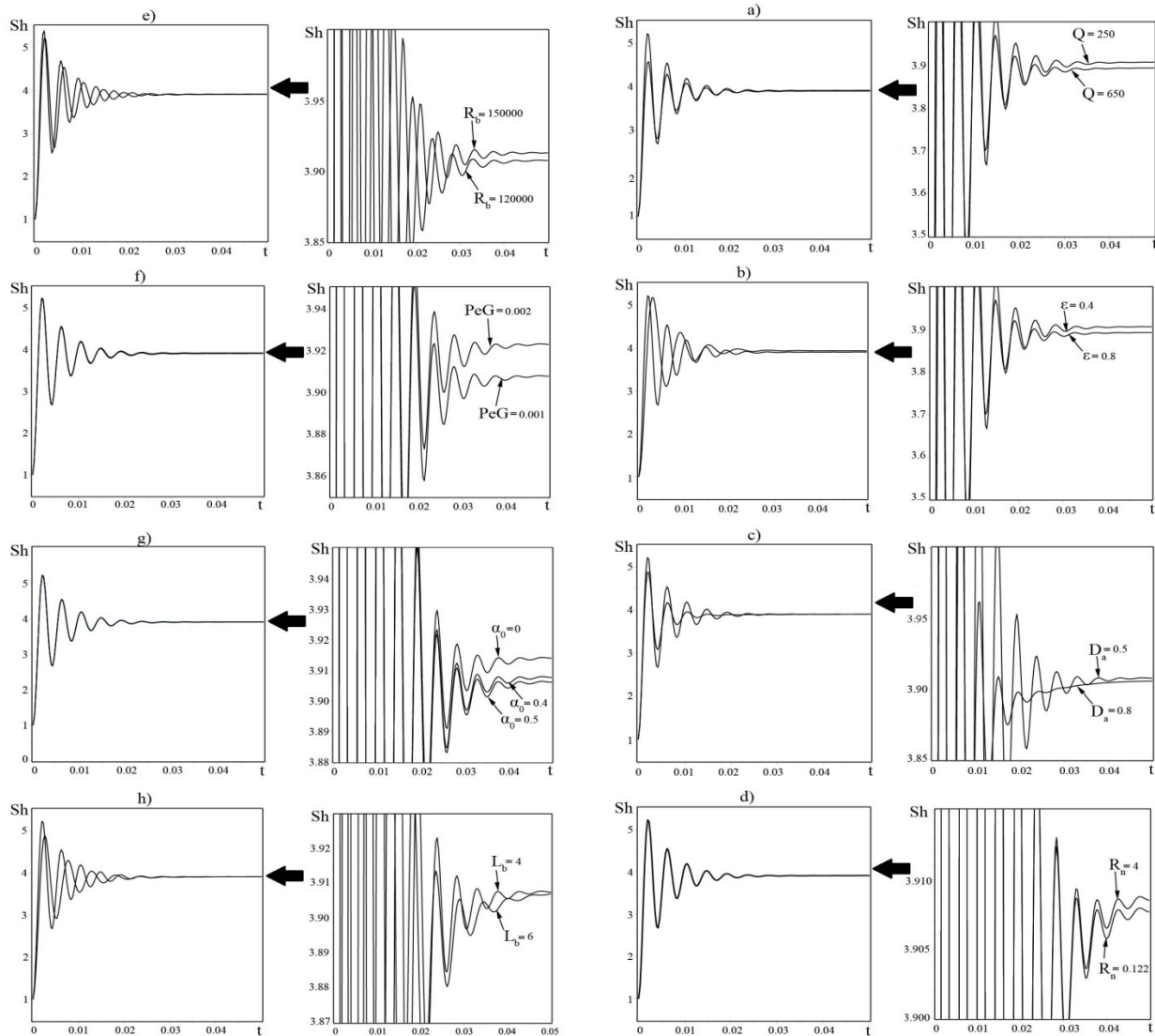
According to Figs. 10b, 10e, and 10f, when porosity  $\varepsilon$ , bioconvection Rayleigh-Darcy number  $R_b$ , and modified gyrotaxis number  $PeG$  increase, the  $Nu(t)$  decreases, indicating a delay in heat transfers.

Figs. 11a-11d and 12a-12d depict the temporary behavior of Sherwood number  $Sh(t)$ , for varying values of magnetic field (Chandrasekhar number  $Q$ ), porosity  $\varepsilon$ , Darcy number  $D_a$ , nanoparticle concentration Rayleigh-Darcy number  $R_n$ , bioconvection Rayleigh-Darcy number  $R_b$ , modified gyrotaxis number  $PeG$ , geometric shape of microorganisms  $\alpha_0$  and bioconvection Lewis number  $L_b$ .

As shown in Figs. 11a-11d and 12a-12d, the stationary level of mass transfer of nanoparticles is reached in less time than heat transfer. The Sherwood number varies at small intervals depending on the parameters  $(Q, \varepsilon, D_a, R_n, R_b, PeG, \alpha_0, L_b)$ . Because of the basic distribution of the volumetric concentration of nanoparticles (22), the stationary value of the Sherwood number surpasses 1.



**Figure 10.** Thermal Nusselt number  $Nu(t)$  variation with time  $t$  for various values of: a) Chandrasekhar number  $Q$ ; b) porosity  $\varepsilon$ ; c) Darcy number  $D_a$ ; d) concentration Rayleigh-Darcy number  $Ra_n$ ; e) bioconvection Rayleigh-Darcy number  $R_b$ ; f) modified gyrotaxis number  $PeG$ ; g) geometric shape of microorganisms  $\alpha_0$ ; h) bioconvection Lewis number  $L_b$ .



**Figure 11.** Sherwood number  $Sh(t)$  variation with time  $t$  for various values of: a) Chandrasekhar number  $Q$ ; b) porosity  $\varepsilon$ ; c) Darcy number  $D_a$ ; d) concentration Rayleigh-Darcy number  $Ra_n$ . **Figure 12.** Sherwood number  $Sh(t)$  variation with time  $t$  for various values of: e) bioconvection Rayleigh-Darcy number  $R_b$ ; f) modified gyrotaxis number  $PeG$ ; g) geometric shape of microorganisms  $\alpha_0$ ; h) bioconvection Lewis number  $L_b$ .

## 8. CONCLUSIONS

Under a vertical magnetic field, we investigated linear stability in a horizontal porous media saturated by nanofluid and gyrotactic microorganisms, heated from below and cooled from above, using the Darcy-Brinkman model, which incorporates Brownian motion and thermophoresis. The system with nanoparticle distribution at the top of the fluid layer has also been proposed. The influence of gyrotaxes on the orientation of swimming microorganisms was used in this study. The normal mode method was used for the linear analysis. The impact of various factors on the development of thermal instability was then established. The results are graphically represented. The following are our conclusions for  $Al_2O_3$ -water nanofluid with gyrotactic microorganisms:

- The vertical magnetic field and Darcy number enhance the stability of the system.
- Medium porosity, Lewis number, modified diffusivity ratio and concentration Rayleigh number have a destabilizing influence on the stationary convection of the system.
- An increase in the concentration of gyrotactic microorganisms (or modified bioconvection Rayleigh-Darcy number) enhances the onset of magnetic convection.
- Spherical gyrotactic microorganisms contribute more effectively to the development of thermal instability.

Similar conclusions are also valid for metallic and semiconductor nanofluids. It has been determined that copper-nanofluid is more stable than silver-water, whereas silicon oxide-water nanofluid is more stable than titanium oxide-water nanofluid, according to a comparative investigation of thermal instability using metallic and semiconducting nanofluids.

Graphic representation of the nonlinear theory results for  $Al_2O_3$ -water nanofluid containing gyrotactic microorganisms. The following conclusions may be taken from these research results:

- The convective heat transport (Nusselt number  $Nu(t)$ ) is enhanced with increasing  $Q, D_a, R_n, \alpha_0$ , and  $L_b$ .
- Convective heat transport decreases as  $\varepsilon, R_b$ , and  $PeG$  increase.
- When the parameters  $Q, \varepsilon, D_a, R_n, R_b, PeG, \alpha_0$ , and  $L_b$  are changed, the stationary value of mass transfer is established faster than convective heat transfer and is approximately  $Sh(t) \approx 3.9$  at an initial value of  $Sh(0) = 1$ .

The results of the theoretical studies presented in this work can be applied in geophysics, especially in the study of sea flows through a porous medium (the ocean crust) containing nanoparticles and gyrotactic microorganisms, as well as in designing biosensors.

#### ORCID IDs

- ©Michael I. Kopp, <https://orcid.org/0000-0001-7457-3272>; ©Volodymyr V. Yanovsky, <https://orcid.org/0000-0003-0461-749X>  
©Ulavathi S. Mahabaleswar, <https://orcid.org/0000-0003-1380-6057>

#### REFERENCES

- [1] D. Ingham and L. Pop, *Transport Phenomena in Porous Media* (Elsevier, Oxford, 2005).
- [2] D. A. Nield and A. Bejan, *Convection in porous media* (Springer, New York, 2006).
- [3] P. Vadasz, "Instability and convection in rotating porous media: A review," *Fluids*, **4**, 147 (2019), <https://doi.org/10.3390/fluids4030147>
- [4] S. Choi, "Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles," in *Development and applications of Non-Newtonian flows*, Vol. **66**, edited by D. A. Signier and H. P. Wang (ASME, New York, 1995) pp. 99-105.
- [5] J. Buongiorno, "Convective Transport in Nanofluids," *J. Heat Trans.*, **128**, 240 (2005), <https://doi.org/10.1115/1.2150834>
- [6] D. Tzou, "Thermal instability of nanofluids in natural convection," *Int. J. Heat Mass Transf.*, **51**, 2967 (2008), <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.09.014>
- [7] D.A. Nield, and A.V. Kuznetsov, "Thermal instability in a porous medium layer saturated by a nanofluid," *Int. J. Heat Mass Transfer*, **52**, 5796 (2009), <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2009.07.023>
- [8] A.V. Kuznetsov, and D.A. Nield, "Thermal instability in a porous medium layer saturated by a nanofluid: Brinkman model," *Transp. Porous Media*, **81**, 409 (2010), <https://doi.org/10.1007/s11242-009-9413-2>
- [9] B.S. Bhaduria, and S. Agarwal, "Natural convection in a nanofluid saturated rotating porous layer: A nonlinear study," *Transp. Porous Media*, **87**, 585 (2011), <https://doi.org/10.1007/s11242-010-9702-9>
- [10] D. Yadav, G.S. Agrawal, and R. Bhargava, "Thermal instability of rotating nanofluid layer," *Int. J. Eng. Sci.*, **49**, 1171-1184 (2011), <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2011.07.00>
- [11] G.C. Rana, and R. Chand, "On the onset of thermal convection in a rotating nanofluid layer saturating a Darcy-Brinkman porous medium: a more realistic model," *J. Porous Media*, **18**, 629 (2015), <https://doi.org/10.1615/JPorMedia.v18.i6.60>
- [12] U. Gupta, J. Ahuja, and R.K. Wanchoo, "Magneto convection in a nanofluid layer," *Int. J. Heat Mass Transfer*, **64**, 1163 (2013), <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2013.05.035>
- [13] J. Ahuja, U. Gupta, and R.K. Wanchoo, "Hydromagnetic Stability of Metallic Nanofluids (Cu-Water and Ag-Water) Using Darcy-Brinkman Model," *Int. J. Geophys.*, **2016**, 9 (2016), <https://doi.org/10.1155/2016/5864203>
- [14] J. Sharma, U. Gupta, and R.K. Wanchoo, "Magneto Binary Nanofluid Convection in Porous Medium," *Int. J. Chem. Eng.*, **2016**, 8 (2016), <https://doi.org/10.1155/2016/9424036>
- [15] D. Yadav, R.A. Mohamed, H.H. Cho, and J. Lee, "Effect of Hall Current on the Onset of MHD Convection in a Porous Medium Layer Saturated by a Nanofluid," *J. App. Fluid Mech.*, **9**, 2379 (2016), <https://doi.org/10.18869/acadpub.jafm.68.236.25048>
- [16] J. Ahuja, and U. Gupta, "Magneto convection of rotating nanofluids in porous medium: metals and semiconductors as nanoparticles," *Research Journal of Science and Technology*, **09**, 135 (2017), <https://doi.org/10.5958/2349-2988.2017.00022.5>
- [17] A.J. Chamkha, S.K. Jena, and S.K. Mahapatra, "MHD convection of nanofluids: A review," *J. Nanofluids*, **4**, 271 (2015), <https://doi.org/10.1166/jon.2015.1166>
- [18] J. Ahuja, and J. Sharma, "Rayleigh-benard instability in nanofluids: a comprehensive review," *Micro and Nano Syst. Lett.* **8**, 21 (2020), <https://doi.org/10.1186/s40486-020-00123-y>
- [19] T.J. Pedley, N.A. Hill, and J.O. Kessler, "The growth of bioconvection patterns in a uniform suspension of gyrotactic microorganisms," *J. Fluid Mech.*, **195**, 223 (1988). <https://doi.org/10.1017/S0022112088002393>
- [20] N.A. Hill, T.J. Pedley, and J.O. Kessler, "Growth of bioconvection patterns in a suspension of gyrotactic microorganisms in a layer of finite depth," *J. Fluid Mech.* **208**, 509 (1989), <https://doi.org/10.1017/s0022112088002393>
- [21] T.J. Pedley, and J.O. Kessler, "Hydrodynamic phenomena in suspensions of swimming microorganisms," *Ann. Rev. Fluid Mech.* **24**, 313 (1992), <https://doi.org/10.1146/ANNUREV.FL.24.010192.001525>
- [22] A.A. Avramenko, "Model of Lorenz instability for bioconvection", *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.* **10**, 68 (2010).
- [23] E. Lorenz, "Deterministic nonperiodic flow," *J. Atmos. Sci.* **20**, 130 (1963), [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1963\)020<0130:DNF>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1963)020<0130:DNF>2.0.CO;2)
- [24] A.V. Kuznetsov, "The onset of nanofluid bioconvection in a suspension containing both nanoparticles and gyrotactic microorganisms," *Int. Commun. Heat Mass Transfer*, **37**, 1421 (2010), <https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2010.08.015>
- [25] A.V. Kuznetsov, "Non-oscillatory and oscillatory nanofluid bio-thermal convection in a horizontal layer of finite depth," *Eur. J. Mech. B. Fluids*, **30**, 156 (2011), <https://doi.org/10.1016/j.euromechflu.2010.10.007>
- [26] S. Saini, and Y.D. Sharma, "A Bio-Thermal Convection in WaterBased Nanofluid Containing Gyrotactic Microorganisms: Effect of Vertical Throughflow," *J. Appl. Fluid Mech.*, **11**, 895 (2018), <https://doi.org/10.29252/jafm.11.04.28062>
- [27] N. Faiza, A. Shafiq, L. Zhao, and A. Naseem, "MHD biconvective flow of Powell Eyring nanofluid over stretched surface," *AIP Advances*, **7**, 065013 (2017), <https://doi.org/10.1063/1.4983014>

- [28] S. Zuhra, N.S. Khan, Z. Shah, and S. Islam, "Simulation of bioconvection in the suspension of second grade nanofluid containing nanoparticles and gyrotactic microorganisms," *Aip Advances*, **8**, 105210 (2018), <https://doi.org/10.1063/1.5054679>
- [29] S.M. Atif, S. Hussain, and M. Sagheer, "Magnetohydrodynamic stratified bioconvective flow of micropolar nanofluid due to gyrotactic microorganisms," *Aip Advances*, **9**, 025208 (2019), <https://doi.org/10.1063/1.5085742>
- [30] A.A.M. Arafat, Z.Z. Rashed, and S.E. Ahmed, "Radiative MHD bioconvective nanofluid flow due to gyrotactic microorganisms using Atangana-Baleanu Caputo fractional derivative," *Phys. Scr.* **96**, 055211 (2021). <https://doi.org/10.1088/1402-4896/abe82d>
- [31] M.I. Asjad, N. Sarwar, B. Ali, S. Hussain, T. Sitthiwiraththa, and J. Reunsumrit, "Impact of Bioconvection and Chemical Reaction on MHD Nanofluid Flow Due to Exponential Stretching Sheet," *Symmetry*, **13**, 2334 (2021). <https://doi.org/10.3390/sym13122334>
- [32] A.V. Kuznetsov, and A.A. Avramenko, "Stability Analysis of Bioconvection of Gyrotactic Motile Microorganisms in a Fluid Saturated Porous Medium," *Transp. Porous Media*, **53**, 95 (2003). <https://doi.org/10.1023/A:1023582001592>
- [33] D.A. Nield, A.V. Kuznetsov, and A.A. Avramenko, "The onset of bioconvection in a horizontal porous-medium layer", *Transp. Porous Media*, **54**, 335 (2004). <https://doi.org/10.1023/B:TIPM.0000003662.31212.5b>
- [34] A.A. Avramenko, and A.V. Kuznetsov, "The Onset of Convection in a Suspension of Gyrotactic Microorganisms in Superimposed Fluid and Porous Layers: Effect of Vertical Throughflow", *Transp. Porous Media*, **65**, 159 (2006), <https://doi.org/10.1007/s11242-005-6086-3>
- [35] A.V. Kuznetsov, "The onset of thermo-bioconvection in a shallow fluid saturated porous layer heated from below in a suspension of oxytactic microorganisms," *Eur. J. Mech. B/Fluids*, **25**, 223 (2006), <https://doi.org/10.1016/j.euromechflu.2005.06.003>
- [36] D.A. Nield, and A.V. Kuznetsov, "The cheng-minkowycz problem for natural convective boundary layer flow in a porous medium saturated by a nanofluid: A revised model," *Int. J. Heat Mass Transfer*, **65**, 682 (2013), <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2013.06.054>
- [37] M. Zhao, S. Wang, H. Wang, and U.S. Mahabaleshwar, "Darcy-Brinkman bio-thermal convection in a suspension of gyrotactic microorganisms in a porous medium", *Neural Comput. Appl.* **31**, 1061 (2019), <https://doi.org/10.1007/s00521-017-3137-y>
- [38] A. Mahdy, "Gyrotactic Microorganisms Mixed Convection Nanofluid Flow along an Isothermal Vertical Wedge in Porous Media", *Int. J. Aerosp. Mech. Eng.* **11**, 840 (2017). <https://doi.org/10.5281/zenodo.1130959>
- [39] A. Alsenafi, and M. Ferdow, "Dual solution for double-diffusive mixed convection opposing flow through a vertical cylinder saturated in a darcy porous media containing gyrotactic microorganisms", *Sci. Rep.*, **11**, 19918 (2021), <https://doi.org/10.1038/s41598-021-99277-x>
- [40] H.A. Nabwey, S.M.M. EL-Kabeir, A. Rashad, and M. Abdou, "Gyrotactic microorganisms mixed convection flow of nanofluid over a vertically surfaced saturated porous media", *Alex. Eng. J.* **61**, 1804 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.aej.2021.06.080>
- [41] S. Chandrasekhar, *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability* (Dover, New York, 1981).
- [42] Y. Yang, Z.G. Zhang, E.A. Grulke, W.B. Anderson, and G. Wu, "Heat transfer properties of nanoparticle-in-fluid dispersions (nanofluids) in laminar flow," *Int. J. Heat Mass Transfer*, **48**, 1107 (2005), <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2004.09.038>
- [43] J.C. Umavathi, D. Yadav, and M.B. Mohite, "Linear and nonlinear stability analyses of double-diffusive convection in a porous medium layer saturated in a maxwell nanofluid with variable viscosity and conductivity", *Elixir Mech. Engg.* **79**, 30407 (2015)
- [44] S. Agarwal, N. Sacheti, P. Chandran, B.S. Bhaduria, and A.K. Singh, "Non-linear Convective Transport in a Binary Nanofluid Saturated Porous Layer", *Transp. Porous Media*, **93**, 29 (2012), <https://doi.org/10.1007/s11242-012-9942-y>
- [45] M. Zhao, S. Wang, S. Li, Q. Zhang, and U. Mahabaleshwar, "Chaotic Darcy-Brinkman convection in a fluid saturated porous layer subjected to gravity modulation", *Results Phys.* **9**, 1468 (2018), <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2018.04.047>

### БІОТЕРМАЛЬНА КОНВЕКЦІЯ В ПОРИСТОМУ СЕРЕДОВИЩІ, ЯКЕ НАСИЧЕНЕ НАНОРІДИНОЮ ТА МІСТИТЬ ГІРОТАКТИЧНІ МІКРООРГАНІЗМИ, ПІД ЗОВНІШНІМ МАГНІТНИМ ПОЛЕМ

Михайло Й. Копп<sup>a</sup>, Володимир В. Яновський<sup>a,b</sup>, Улаваті С. Махабалешвар<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Інститут монокристалів, Національна Академія Наук України  
пр. Науки 60, 61001 Харків, Україна

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

<sup>c</sup>Факультет математики, Шівгаганотрі, Університет Давангере, Давангере, Індія 577 007

Вивчення теплової конвекції в пористих середовищах, які насичені нанорідиною та мікроорганізмами, є важливим завданням для багатьох геофізичних та інженерних програм. Концепція суміші нанорідин та мікроорганізмів приваблює багатьох дослідників через її здатність покращувати теплові властивості та, як наслідок, швидкості теплообміну. Ця властивість активно використовується як в електронних системах охолодження, так і біофізиці. Таким чином, метою цього дослідження є вивчення біотермальної нестійкості в пористому середовищі, яке насичене нанорідиною на водній основі, що містить гіротактичні мікроорганізми, у присутності вертикального магнітного поля. Наявність зовнішнього магнітного поля як у природних, так і в технологічних ситуаціях, стимулювала нас у проведенні цього теоретичного дослідження. З використанням моделі Дарсі-Брінкмана розглянуто лінійний аналіз конвективної нестійкості для обох вільних меж з урахуванням ефектів броунівської дифузії та термофорезу. Для проведення цього аналітичного дослідження було використано метод Галеркіна. Встановлено, що теплообмін здійснюється стаціонарною конвекцією без коливальних рухів. У стаціонарних режимах конвекції аналізуються нанорідини оксидів металів ( $Al_2O_3$ ), металеві нанорідини ( $Cu$ ,  $Ag$ ) та напівпровідникові нанорідини ( $TiO_2$ ,  $SiO_2$ ). Збільшення чисел Чандрасекара та Дарсі значно покращує стабільність системи, але збільшення пористості та модифікованого біоконвекційного числа Релея-Дарсі прискорюють початок нестійкості. Для визначення перехідного режиму тепломасоперенесення застосовується нелінійна теорія, заснована на представленні методу рядів Фур'є. На малих проміжках часу числа Нуссельта та Шервуда мають коливальний характер. Числа Шервуда (масообмін) у часовому інтервалі досягають стаціонарних значень швидше, ніж числа Нуссельта (теплообмін). Це дослідження може допомогти у вивченні конвекції морської води в океанічній корі, а також у створенні біосенсорів.

**Ключові слова:** нанорідина, біотеплова конвекція, сила Лоренца, термофорез, броунівський рух, гіротактичний мікроорганізм, магнітне поле

## ANALYSIS OF $\alpha$ - $^{208}\text{Pb}$ ELASTIC SCATTERING IN A WIDE ENERGY RANGE BY THE S-MATRIX MODEL<sup>†</sup>

Yuri A. Berezhnoy<sup>a,‡</sup>, Gennadiy M. Onyshchenko<sup>a</sup>, Volodymyr V. Pilipenko<sup>b\*</sup>,  
Pylyp E. Kuznietsov<sup>a</sup>, Ivan I. Yakymenko<sup>a</sup>

<sup>a</sup>V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv 61022, Ukraine

<sup>b</sup>National Science Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology", Kharkiv 61108, Ukraine

\*Correspondence Author: [vpilipenko@kipt.kharkov.ua](mailto:vpilipenko@kipt.kharkov.ua); <sup>‡</sup>E-mail: [yuberezhnoy@karazin.ua](mailto:yuberezhnoy@karazin.ua)

Received August 31, 2022; revised October 5, 2022; accepted October 21, 2022

The paper analyzes the elastic scattering of  $\alpha$ -particles on heavy  $^{208}\text{Pb}$  nuclei at energies 26–175 MeV/nucleon using the original six-parameter  $S$ -matrix model, taking into account the strong absorption and pronounced effects of refraction of scattered waves. By fitting experimental data from the literature, measured in a wide range of energies: 104, 139, 166, 172, 240, 288, 340, 386, 480, and 699 MeV, the diffraction and refractive patterns of scattering have been investigated. The behavior of the found parameters of the model, as well as of the total reaction cross-section, the angles of crossover of the near and far components of the scattering amplitude (Fraunhofer intersection), and the angles of the nuclear rainbow have been studied and a comparison with the differential cross sections calculated according to the optical model is presented.

**Keywords:** Elastic Scattering; Scattering Matrix;  $^4\text{He}+^{208}\text{Pb}$ ; Nuclear Refraction; Nuclear Rainbow; Fraunhofer Crossover, Airy Minimum, Total Cross-Section

**PACS:** 25.55.Ci, 24.10.Ht

Investigation of hadron interaction with nuclei is an important source of information about the nuclear structure and mechanisms of the nuclear interaction. Approaches based on different potentials (optical model) or scattering matrix ( $S$ -matrix) are used for the theoretical description of appropriate experimental data.

In the intermediate energy region, it is possible to consider the nucleus (by analogy with optics) as a drop of liquid which strongly absorbs incident particles. The most common approach is the optical model of nuclear scattering, which uses the model complex potentials with an imaginary part describing the incident hadron absorption by nuclei. Such an approach demands to solving the Schrödinger equation numerically to calculate different scattering characteristics and analyze their physical properties.

An alternative approach is the analyzing of experimental data based on a model  $S$ -matrix specifically parametrized in the angular momentum or impact parameter space. In this case, it is often possible to obtain analytical expressions for the amplitudes and cross-sections of the analyzed processes, which makes it possible to study their dependence on different parameters of the  $S$ -matrix, and to understand deeper their physical meaning. Moreover, a reasonable parameterization of the  $S$ -matrix, containing a minimal number of parameters with a clear physical meaning, allows one to analyze experimental data in relatively wide ranges of energies and scattering angles, where different physical phenomena (Fraunhofer and Fresnel scattering, rainbow scattering etc.) are observed. In this case, certain difficulties of the optical model (uncertainty of the choice of parameters of the potential, non-Hermiticity of the Hamiltonian) are present. Besides, this approach allows one to understand certain features of the behavior of the differential cross-section of nuclear processes.

When 100–700 MeV alpha-particles are scattered on heavy nuclei, we obtain rapidly decreasing Fraunhofer oscillations of the elastic scattering differential cross-section in the region of small scattering angles. Further, we obtain a broad maximum, after which the cross-section decreases smoothly in the region of large scattering angles. Such a cross-section behavior is typically interpreted as a rainbow scattering [1-3]. However, while the energy of incident alpha-particles is increasing, the rainbow maximum becomes less pronounced, and the cross-section in the region of large angles is rapidly decreasing because it is determined by the far-side part of scattering amplitude, corresponding to the scattering from the far side of the target nucleus relative to the detector.

The rainbow scattering can be observed due to the little transparency of the target nucleus for the scattered light nuclei. In the case of rainbow scattering, the light incident particle comes into the inner region of the nucleus. Consequently, we obtain additional information about the inner nucleus structure by analyzing the differential cross-section. The rainbow scattering effect (which plays an essential role in nuclear collisions at intermediate energies) is also observed in the elastic scattering of  $^3\text{H}$ ,  $^3\text{He}$ ,  $^6\text{Li}$ ,  $^9\text{Be}$ ,  $^{11}\text{B}$ ,  $^{12}\text{C}$  etc. by light and intermediate nuclei [2].

To find out the behavior of differential cross-section, it is necessary to determine the dependence of the quantum deflection function on the impact parameter or the angular momentum. If the deflection function has a deep minimum at negative values, it is possible to observe the nuclear rainbow scattering. Due to a small transparency in the scattering of some nuclei ( $^9\text{Be}$ ,  $^{12}\text{C}$  and others) one can observe only a faint hint of the rainbow scattering. This behavior of cross-section is called a rainbow ghost [1].

<sup>†</sup> **Cite as:** Yu.A. Berezhnoy, G.M. Onyshchenko, V.V. Pilipenko, P.E. Kuznietsov, and I.I. Yakymenko, East Eur. J. Phys. 4, 48 (2022), <https://doi.org/10.26565/2312-4334-2022-4-03>

© Y.A. Berezhnoy, G.M. Onyshchenko, P.E. Kuznietsov, V.V. Pilipenko, I.I. Yakymenko, 2022



The picture of rainbow scattering in the region of intermediate energies ( $E \geq 20$  MeV – 30 MeV/nucleon) for light and medium target nuclei and at somewhat higher energies for heavy nuclei is also determined by the combination of absorbing and refracting properties of the nuclear matter of the target with respect to the incident hadron and by the Coulomb interaction of colliding particles. Of particular interest is the cross-section behavior in the region of crossover of the near and far components of the scattering amplitude (Fraunhofer crossover) in a wide interval of energies for the elastic scattering of alpha particles on heavy nuclei.

This work analyzes and clarifies the regularities of elastic scattering of  $\alpha$ -particles on heavy target nuclei ( $^{208}\text{Pb}$ ) at energies up to 175 MeV/nucleon, inherent in the observed refraction phenomena. In this work, the diffraction and refraction phenomena in the scattering of  $\alpha$ -particles on the heavy  $^{208}\text{Pb}$  nucleus, as well as the interaction mechanisms of  $\alpha$ -particles with these heavy nuclei, are investigated in the wide energy range from 104 to 699 MeV using of an original S-matrix model. The work is performed in the S-matrix approach, which was developed to describe the absorption and refraction effects in the elastic scattering of light nuclei at intermediate energies. We have obtained the scattering matrix parameters by fitting the experimental data on the elastic scattering of  $\alpha$ -particles on the heavy  $^{208}\text{Pb}$  nucleus for this S-matrix parameterization. We have determined the cross-section behavior in the region of crossover of the near and far components of the scattering amplitude (Fraunhofer crossover) and the angles of the nuclear rainbow in the wide interval of energies for the  $\alpha$ - $^{208}\text{Pb}$  elastic scattering.

To compare the fitting data quality, when using the above-mentioned model, we also present the results of analyzing the elastic scattering  $\alpha$ - $^{208}\text{Pb}$  at energies from 104 to 699 MeV by an alternative six-parameter optical model [4].

Based on the phenomenological S-matrix, we accurately describe the cross-sections of the elastic scattering  $\alpha$ - $^{208}\text{Pb}$  for the broad energy range of 104–699 MeV. This calculation results show the existence of strong nuclear refraction effects for the considered cases of elastic scattering, which can be interpreted as a “rainbow scattering”.

The analysis identifies the nuclear rainbow effect in the differential cross-sections of elastic scattering  $^{208}\text{Pb}(^4\text{He}, ^4\text{He})^{208}\text{Pb}$  for  $E(^4\text{He})= 104$  [5], 139 [6], 166 [7], 172 [8], 240 [9], 288, 340 [10], 386 [11], 480, and 699 [10] MeV. The results show that the S-matrix parameters for the investigated cross-sections are sensitive to the interaction in the inner area of these heavy nuclei.

Besides investigating the nuclear rainbow for the elastic  $\alpha$ - $^{208}\text{Pb}$  scattering, we analyze the behavior of the Fraunhofer crossover angle and the nuclear rainbow angle depending on the energy value and the change in the shape of the quantum deflection function. It has been established that the Fraunhofer crossover angle  $\theta_{cr}$  and the nuclear rainbow angle  $\theta_r$  depend on the energy according to the exponential law as  $\theta \sim \exp(-aE)$ .

We also analyze the behavior of the nuclear refraction parameter  $\delta_1$  depending on the energy, which decreases exponentially, and nuclear transparency coefficient  $\varepsilon$ , which increases approximately linearly while the energy increases.

We investigate the behavior of critical radii  $L_{0/1}/k$  and diffuseness parameters  $\Delta_{0/1}/k$  of the strong absorption and nuclear refraction regions, which have an approximately linear dependence on the energy.

Therefore, the results indicate smooth, physically substantiated changes in the values of the parameters with a change in energy, which have a clear semiclassical interpretation.

## 1. S-MATRIX PARAMETERIZATION

In this work we use the following expression for the elastic scattering amplitude in terms of the S-matrix elements:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [S_l - 1] P_l(\cos \theta), \quad (1)$$

where  $\theta$  is the scattering angle;  $l$  is the angular momentum;  $k$  is the wave vector of the incident particle;  $S_l$  are the diagonal matrix element of the scattering operator in the representation of angular momentum,  $P_l(\cos \theta)$  are the Legendre polynomials.

In doing so, we use the following original parametrization of the S-matrix as a function of the moment [1]:

$$S(L) = \exp\{-2\delta_a(L) + 2i[\delta_r(L) + \sigma_c(L)]\} = \eta(L) \exp\{2i[\delta_r(L) + \sigma_c(L)]\}, \quad (2)$$

$$\eta(L) = \exp[-2\delta_a(L)], \quad \delta_a(L) = \delta_0 g(L, L_0, \Delta_0), \quad (3)$$

$$2\delta_r(L) = \delta_1 g^2(L, L_1, \Delta_1), \quad (4)$$

$$g(L, L_j, \Delta_j) = \frac{\text{sh}(L_j / \Delta_j)}{\text{ch}(L_j / \Delta_j) + \text{ch}(L / \Delta_j)}, \quad j = 0, 1 \quad (5)$$

where  $L = l + 1/2$  is an angular momentum;  $\eta(L)$  is the modulus of the scattering matrix;  $\delta_a(L)$  is the nuclear imaginary phase shift due to the absorption;  $\delta_r(L)$  and  $\sigma_c(L)$  are the nuclear (refractive) and Coulomb phase shifts;  $2\delta_0 = -\ln \varepsilon$  is the intensity of the nuclear absorption,  $\varepsilon \ll 1$  being a parameter which defines the nuclear matter transparency for low moments;  $\delta_1$  is the parameter which characterizes the magnitude of nuclear refraction of the scattered waves;  $L_j$  and  $\Delta_j$

are the parameters which define the linear dimensions and diffuseness of the strong absorption ( $j=0$ ) and nuclear reflection ( $j=1$ ) regions.

The scattering phase  $\delta_{cl}$  in the quasi-classical approximation equals to:

$$\delta_{cl}(L) = k \int_{r_{min}}^{\infty} \left[ \left( 1 - \frac{U(r)}{E} - \frac{L^2}{k^2 r^2} \right)^{1/2} - 1 \right] dr + \frac{\pi L}{2} - kr_{min}, \quad (6)$$

where  $r_{min}$  is the classical distance of the closest approaching of the particle and nucleus, namely this quantity is defined from the equality to zero of the expression under the root in formula (6).

The potential energy of Coulomb interaction of the incident particle with the nucleus is chosen in the form of that for a uniformly charged sphere with the radius  $R_C$ :

$$U_C(R_C, r) = \begin{cases} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2R_C^3} [3R_C^2 - r^2], & r < R_C, \\ \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}, & r \geq R_C, \end{cases} \quad (7)$$

Performing the integration in the expression (6) for the phase of scattering of a point-like charge on the potential of the uniformly charged sphere with the radius  $R_C$  (7) gives the quasi-classical expression for the Coulomb phase  $\sigma_C(L)$  in the following explicit form [1]:

$$\sigma_C(L) = \begin{cases} -\frac{1}{2} \sqrt{L_C^2 - L^2} - \frac{1}{4} p \ln \left[ \frac{(aR_C^2 - p + \sqrt{L_C^2 - L^2})^2}{p^2 + L^2} \right] - n + \\ + n \ln(kR_C - n + \sqrt{L_C^2 - L^2}) + L \left[ \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{L^2 + a p R_C^2}{L \sqrt{L_C^2 - L^2}} + \right. \\ \left. + \operatorname{arctg} \left( L \frac{n \sqrt{L_C^2 - L^2} - L^2 - n k R_C}{L^2 \sqrt{L_C^2 - L^2} + n L^2 + n^2 k R_C} \right) + \frac{\pi}{4} \right], & L < L_C, \\ \frac{n}{2} \ln(L^2 + n^2) + L \operatorname{arctg} \frac{n}{L} - n, & L \geq L_C, \end{cases} \quad (8)$$

where  $L_C = (k^2 R_C^2 - 2nkR_C)^{1/2}$ ;  $k = \sqrt{2mE} / \hbar$ ;  $a = (nk / R_C^3)^{1/2}$ ;  $p = (3nk / R_C - k^2) / (2a)$ ;  $n = \mu Z_1 Z_2 e^2 / (\hbar^2 k)$  is the Sommerfeld parameter;  $Z_1$  and  $Z_2$  are charge numbers of the incident particle and target nucleus;  $\mu = (m_1 m_2) / (m_1 + m_2)$  is the reduced mass; for the scattering of  $\alpha$ -particles one can take  $R_C = 1.3 \sqrt{A}$  fm, where  $A$  is the mass number of the target nucleus.

In the quasi-classical approximation, for particles approaching close to the nucleus boundary (grazing collisions), a boundary moment of strong absorption  $L_s$  is introduced. For the  $S$ -matrix model it is defined from the relation  $|S(L_s)| = \eta(L_s) = (1 + \varepsilon) / 2$ , where modulus  $\eta(L)$  is defined from equation (3). Taking into account the deflection of incident particles in the Coulomb field, the quasi-classical boundary moment  $L_s$  is connected with the radius of strong absorption  $R_s$  by the relation:

$$L_s = kR_s \left[ 1 - \frac{2n}{kR_s} + \frac{1}{(2kR_s)^2} \right]^{1/2}. \quad (9)$$

The radius  $R_s$  of the strong absorption region can be found from equality (9):

$$R_s = \frac{1}{k} \left[ n + \left( L_s^2 + n^2 - \frac{1}{4} \right)^{1/2} \right]. \quad (10)$$

The formula (8) gives a good approximation if the condition  $n / (L^2 + n^2) \ll 1$  is satisfied (see [12]). In our calculations, in the  $L \geq L_C$  region we use the exact expression for the Coulomb phase, which yields values very close to the corresponding values for  $\sigma_C(L)$  from the quasi-classical expression (8).

The differential cross-section of elastic scattering is calculated as:

$$\sigma(\theta) \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2. \quad (11)$$

The quantum deflection function  $\Theta(L)$  is related to the scattering phase  $\delta(L) = \delta_r(L) + \sigma_c(L)$  by the formula:

$$\Theta(L) = 2 \frac{d}{dL} \delta(L). \quad (12)$$

The nuclear rainbow angle  $\theta_r$  is defined as the depth of a minimum of the quantum deflection function (12). The nuclear rainbow effect is clearly observed only if the angle  $\theta_r$  is substantially less than  $180^\circ$ . This condition is true if the energy of incident particle is not close to a specific critical energy  $E_{cr}$  (see [13]). For energies less than energy  $E_{cr}$ , the rainbow structures in the cross-section are mainly observed for  $\alpha$ -particle scattering on light and medium nuclei.

The search for the model parameters was carried out by obtaining the best agreement between the calculated elastic scattering cross section and the experimental data by minimizing the standard quantity  $\chi^2$ . Experimental errors were normally taken to be 10% for all the data under consideration.

The formation of complex structures observed in the studied elastic scattering cross sections (for example, the Fraunhofer crossover) is analyzed using the decomposition of these cross-sections into near- and far-side components (see [1,14,15,16]).

## 2. RAINBOW EFFECTS IN THE ELASTIC SCATTERING OF $\alpha$ -PARTICLES ON $^{208}\text{Pb}$ NUCLEI IN THE ENERGY RANGE $E=104\text{ MeV}-669\text{ MeV}$

We present the results of the analysis of the available data on the elastic scattering of light ions  $^4\text{He}$  on the  $^{208}\text{Pb}$  nucleus in the energy range  $E_\alpha = 104-699\text{ MeV}$ , which is aimed at studying manifestations of the nuclear rainbow effect in this wide range of  $\alpha$ -particle energies and determining the possibility of describing the differential cross-sections for  $^4\text{He}$  scattering by heavy nuclei at intermediate energies using the  $S$ -matrix model, being an alternative to the optical model. We apply the 6-parameter model representation of the  $S$ -matrix [1], which was recently used for analyzing the  $^4\text{He}$  scattering on light nuclei ( $^{12}\text{C}$  [2]) and  $^{24}\text{Mg}$  [3]) and turned out to be successful in describing the nuclear rainbow picture of the  $^4\text{He}$  scattering on these light nuclei at energies from 50 to 386 MeV. The  $S$ -matrix parameters for the investigated scattering cases have been obtained from analyzing the available experimental data (10 data sets) of the  $^4\text{He}+^{208}\text{Pb}$  elastic scattering for energies 104 [5], 139 [6], 166 [7], 172 [8], 240 [9], 288, 340 [10], 386 [11], 480 and 699 [10] MeV.

The differential cross-sections of the  $\alpha$ - $^{208}\text{Pb}$  elastic scattering in the energy region  $E_\alpha = 104\text{ MeV}-669\text{ MeV}$ , calculated for the mentioned ten values of energy based on the  $S$ -matrix parametrization in the form (2) – (5), are given in Figs. 1-10. When calculating the scattering amplitude, the sum in formula (1) was taken for a wide range of  $l$  values to ensure sufficient accuracy of the calculated cross-sections. The  $S$ -matrix parameters were found by fitting to the corresponding experimental data [5–11], and further, their dependence on the energy was analyzed (Table). For comparison in Fig. 1-6, 8-10, we also present the differential cross-sections calculated basing on the 6-parameter optical model. In Table 1 the values of  $\chi^2 / N_{\text{optic}}$  are also given for them.

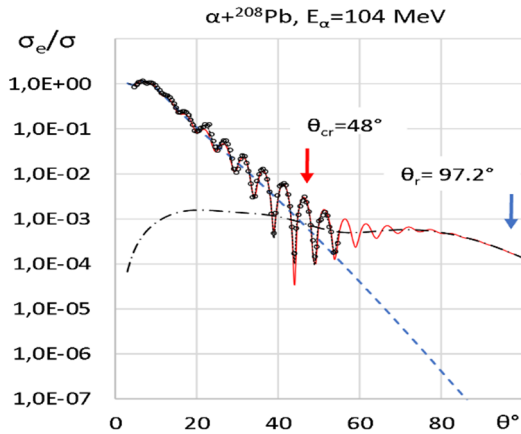
The considered cross-sections are characterized by pronounced refraction scattering pictures (see Figs. 1-10). In general, for the scattering of  $^4\text{He}$  on this heavy nucleus a manifestation of the nuclear rainbow scattering is observed for all considered energies, according to the behavior of the deflection function. The deflection function  $\Theta(L)$  has a shape which is characteristic of the nuclear rainbow, and it is symmetrical with respect to its minimum in the region of negative values.

With the energy increase, we note a gradual decrease of the magnitude of nuclear refraction intensity  $\delta_1$  and increase of the nuclear transparency  $\varepsilon$  (see Table, and Figs. 13,14 below).

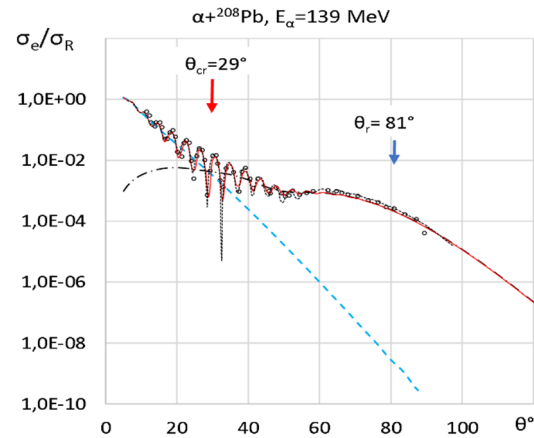
**Table.** Energy evolution of the  $S$ -matrix parameters, the total reaction cross-section  $\sigma_r$ , the nuclear rainbow angle  $\theta_r$ , the Fraunhofer crossover angle  $\theta_{cr}$ , and the  $\chi^2/N$  values for the calculated elastic scattering cross-sections.

$E_\alpha$ , MeV	$k$ , fm $^{-1}$	$L_0$	$L_0/k$ , fm	$L_1$	$L_1/k$ , fm	$\Delta_0$	$\Delta_0/k$ , fm	$\Delta_1$	$\Delta_1/k$ , fm	$\varepsilon$	$\delta_1$	$L_c$	$\chi^2/N$ , $S$ -matr.	$\chi^2/N$ , optic.	$\sigma_r$ , mb	$\theta_r$ , deg	$\theta_{cr}$ , deg
104	4.407	33.653	7.636	30.069	6.823	3.105	0.705	4.671	1.060	0.0022	32.871	28.484	4.3	9.7	3012.3	97.2	48.0
139	5.105	39.070	7.653	34.731	6.803	3.534	0.692	6.150	1.205	0.0025	35.400	34.712	6.0	-	2988.6	81.0	29.0
166	5.588	43.934	7.862	37.594	6.728	2.998	0.537	7.992	1.430	0.0217	28.906	38.869	7.1	16.1	2665.9	47.2	18.5
172	5.691	47.219	8.297	40.270	7.076	3.267	0.574	6.776	1.191	0.0280	23.220	39.737	0.9	-	2953.6	45.1	26.5
240	6.749	51.750	7.668	48.849	7.238	5.572	0.826	7.073	1.048	0.0114	18.205	48.572	6.3	-	3088.5	34.6	17.5
288	7.415	52.698	7.107	52.409	7.068	5.266	0.710	10.810	1.458	0.0018	20.801	54.014	4.9	4.9	2720.0	25.2	9.9
340	8.082	65.088	8.053	58.851	7.282	6.743	0.834	10.777	1.333	0.0510	16.250	59.408	4.9	5.8	3090.8	19.4	10.0
386	8.634	58.850	6.816	66.228	7.671	9.359	1.084	10.850	1.257	0.0088	10.158	63.848	4.3	-	3058.9	10.5	9.1
480	9.682	67.032	6.923	72.599	7.498	8.415	0.869	16.146	1.668	0.0240	10.902	72.198	9.9	8.6	2611.7	7.1	5.7
699	11.83	94.398	7.979	91.522	7.736	8.103	0.685	12.419	1.050	0.1508	4.222	89.167	2.0	6.2	2569.1	2.8	-

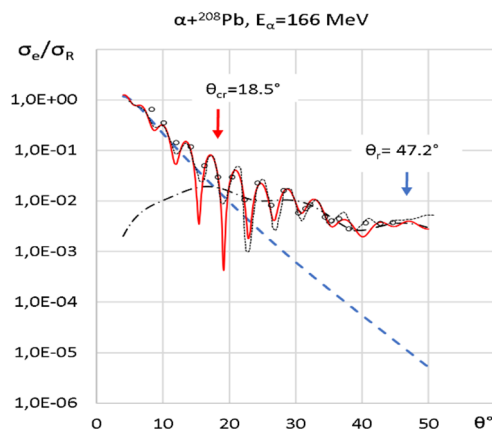
For the energy  $E_\alpha = 139$  MeV the nuclear rainbow effect is pronounced, and the differential cross-section in Fig. 2 has a noticeable “hump”. At the energy  $E_\alpha = 166$  MeV, we observe two clear Airy minima (see Fig. 3).



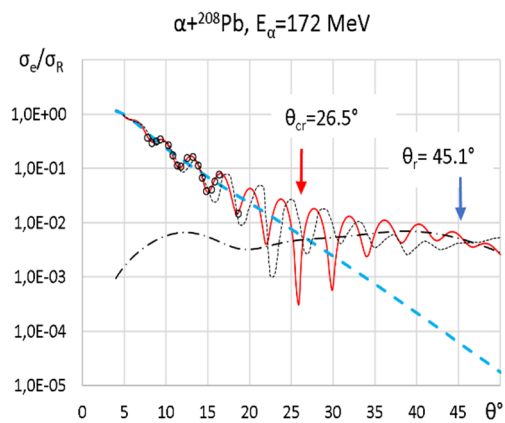
**Figure 1.** Differential cross-section (ratio to the Rutherford one) calculated with the  $S$ -matrix parametrization (2) – (5) and (8) for the elastic scattering  $\alpha+^{208}\text{Pb}$  at  $E_\alpha = 104.0$  MeV (solid line), its far- (dot-dashed line) and near-side (dashed line) components, the dotted line is for the optical model. The experimental data are from [5]. Arrows show the rainbow and crossover angles.



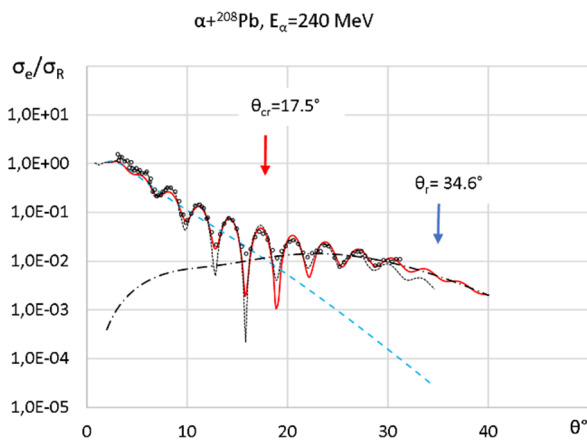
**Figure 2.** The same as in Fig. 1 but for  $E_\alpha = 139.0$  MeV (solid line), its far- (dot-dashed line) and near-side (dashed line) components, the dotted line is for the optical model. The experimental data are from [6].



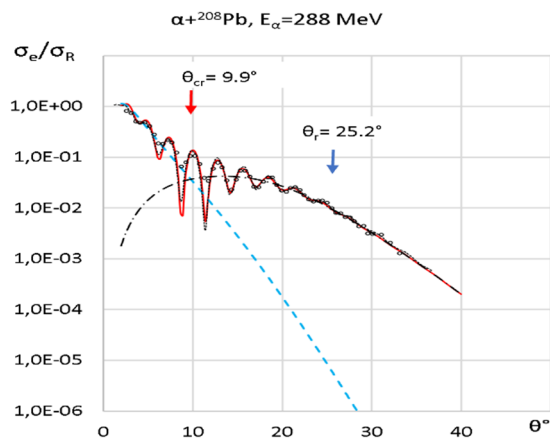
**Figure 3.** The same as in Fig. 1 but for  $E_\alpha = 166.0$  MeV (solid line), its far- (dot-dashed line) and near (dashed line) components, the dotted line is for the optical model. The experimental data are from [7].



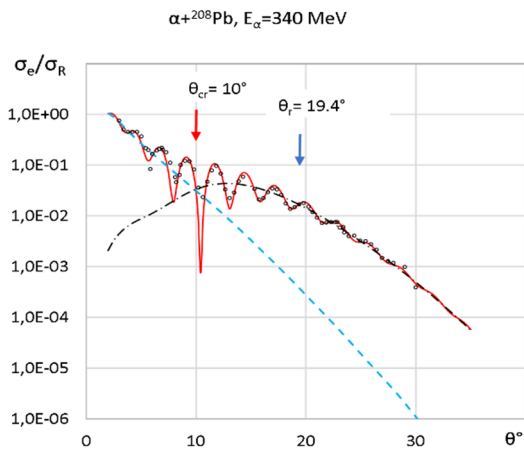
**Figure 4.** The same as in Fig. 1 but for  $E_\alpha = 172.0$  MeV (solid line), its far- (dot-dashed line) and near-side (dashed line) components, the dotted line is for the optical model. The experimental data are from [8].



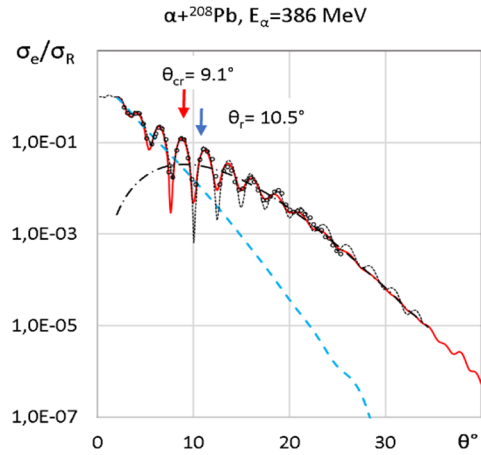
**Figure 5.** The same as in Fig. 1 but for  $E_\alpha = 240.0$  MeV (solid line), its far- (dot-dashed line) and near-side (dashed line) components, the dotted line is for the optical model. The experimental data are from [9].



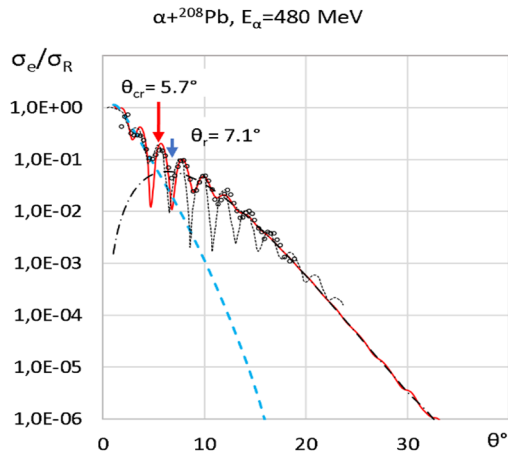
**Figure 6.** The same as in Fig. 1 but for  $E_\alpha = 288.0$  MeV (solid line), its far- (dot-dashed line) and near-side (dashed line) components, the dotted line is for the optical model. The experimental data are from [10].



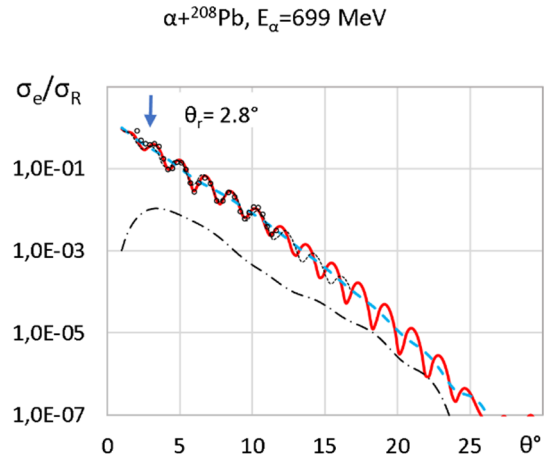
**Figure 7.** The same as in Fig. 1 but for  $E_\alpha = 340.0$  MeV (solid line), its far- (dot-dashed line) and near-side (dashed line) components. The experimental data are from [10].



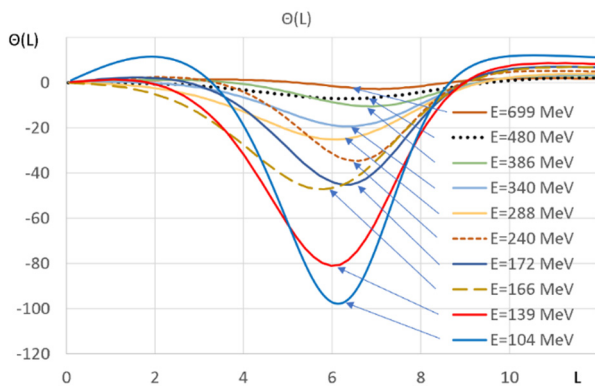
**Figure 8.** The same as in Fig. 1 but for  $E_\alpha = 386.0$  MeV (solid line), its far- (dot-dashed line) and near-side (dashed line) components, the dotted line is for the optical model. The experimental data are from [11].



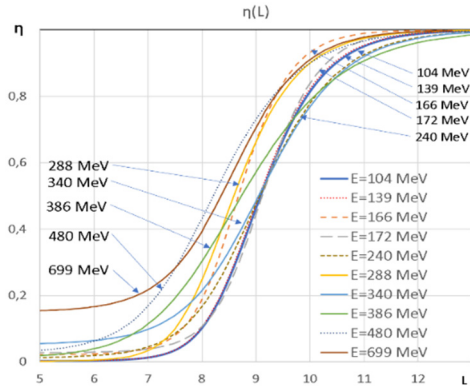
**Figure 9.** The same as in Fig. 1 but for  $E_\alpha = 480.0$  MeV (solid line), its far- (dot-dashed line) and near-side (dashed line) components, the dotted line is for the optical model. The experimental data are from [10].



**Figure 10.** The same as in Fig. 1 but for  $E_\alpha = 699.0$  MeV (solid line), its far- (dot-dashed line) and near-side (dashed line) components, the dotted line is for the optical model. The experimental data are from [10].



**Figure 11.** Quantum deflection function  $\Theta(L)$  (degrees) as a function of angular momentum  $L$  for different energies.



**Figure 12.** Dependence of the scattering matrix modulus  $\eta(L)$  on the angular momentum  $L$  for different energies

Figures 1-10 show that the parameterization of the scattering matrix proposed by us makes it possible to correctly describe the complex behavior of the investigated differential cross-sections of elastic scattering of  $\alpha$ -particles by heavy  $^{208}\text{Pb}$  nuclei in wide ranges of energies and scattering angles. The experimentally measured cross-sections contain several periods

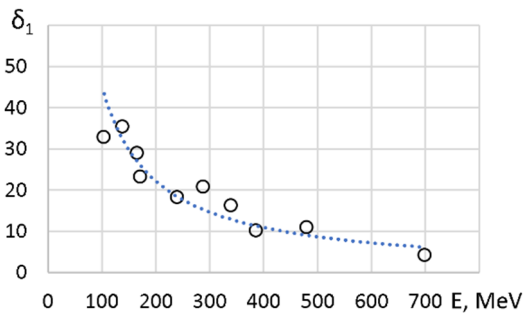
of Fraunhofer oscillations in the region of small scattering angles, then the amplitude of the oscillations decreases and we observe a broad maximum, which is identified as the presence of rainbow scattering (nuclear rainbow).

Let us consider the behavior of the  $S$ -matrix as a function of the angular momentum  $L$  at different energies. Figures 11-12 demonstrate the behavior of the quantum deflection functions  $\Theta(L)$  and the modulus  $\eta(L)$  as functions of the angular momentum  $L$  for all considered cases of scattering for the  $\alpha+^{208}\text{Pb}$  system. Figure 11 shows that the quantum deflection function  $\Theta(L)$  has a deep minimum, which is typical for the nuclear rainbow. While the energy increases, the depth of the minimum of the deflection function  $\Theta(L)$  (the rainbow angle) decreases substantially. Therefore, as can be seen from Figure 11 and Table, with the energy increase the nuclear rainbow angle  $\theta_r$  decreases.

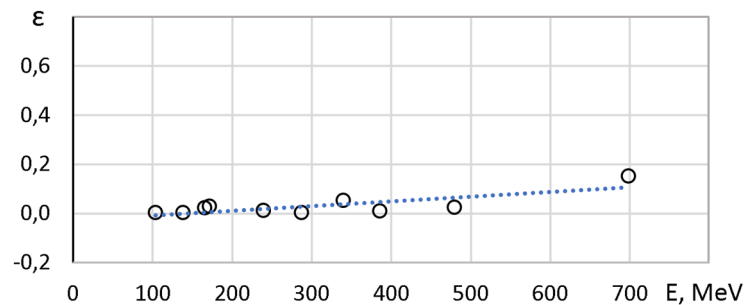
Figure 12 shows that the function  $\eta(L)$  has the form of a “diffuse step”, which changes rapidly at  $L \approx L_0$ , i.e. it demonstrates the effect of strong absorption  $\alpha$ -particles by the lead nucleus at  $L < L_0$ .

The parameter  $\delta_1$ , which characterizes the magnitude of the nuclear scattering phase, decreases with increasing energy (see Fig. 13) according to the law:  $\delta_1 \sim \exp(-aE_\alpha)$ , where  $a = 0.03 \text{ MeV}^{-1}$ .

The behavior of the nuclear matter transparency coefficient  $\varepsilon$  for the heavy  $^{208}\text{Pb}$  nucleus with the energy increase is nearly linear (see Fig. 14), the variations are less than 5%, except for the last energy  $E_\alpha = 699 \text{ MeV}$ , where its increase up to 15% is observed.



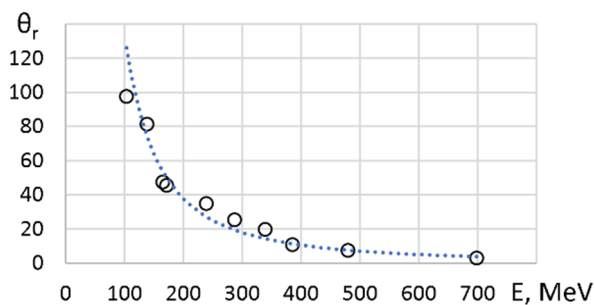
**Figure 13.** Parameter  $\delta_1$  characterizing the magnitude of the nuclear part of scattering phase (refraction coefficient), found on the basis of the  $S$ -matrix in the form (2) – (5) and (8) for the  $\alpha+^{208}\text{Pb}$  elastic scattering, as a function of energy.



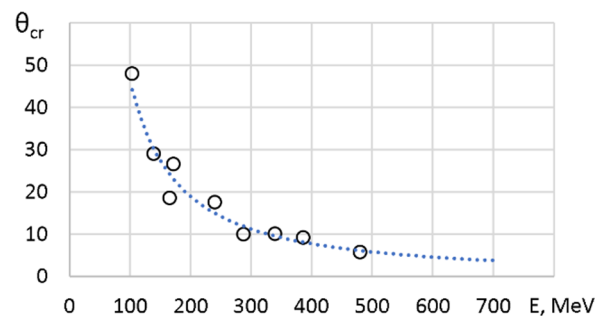
**Figure 14.** Nuclear matter transparency coefficient  $\varepsilon$  calculated basing on the  $S$ -matrix parametrization (2) – (5) and (8) for the  $\alpha+^{208}\text{Pb}$  elastic scattering as a function of energy

Nuclear rainbow angle  $\theta_r$  decreases with the energy increase (Fig. 15) and it may be approximated by the expression:  $\theta_r \sim \exp(-aE_\alpha)$ , where  $a = 1.8 \text{ MeV}^{-1}$ . This is different from the dependence  $\theta_r \sim 1/E$  proposed in [17].

The Fraunhofer crossover angle  $\theta_{cr}$  decreases with the increasing energy (Fig. 16) and it may be approximated by the expression:  $\theta_{cr} \sim \exp(-aE_\alpha)$ , where  $a = 1.3 \text{ MeV}^{-1}$ .



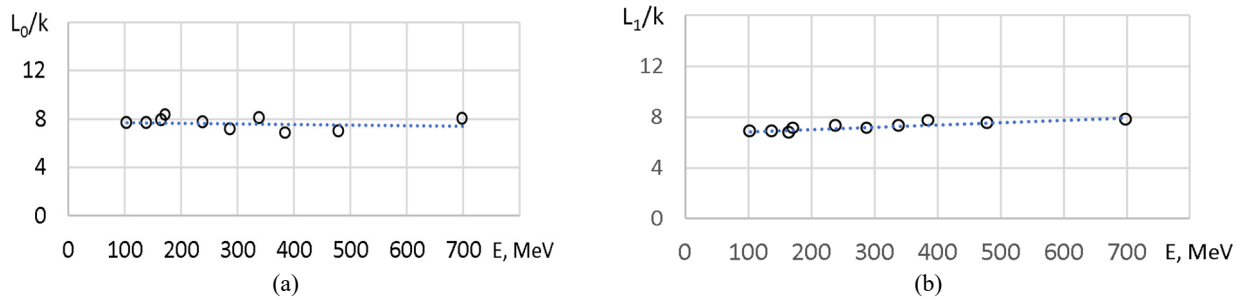
**Figure 15.** Nuclear rainbow angles  $\theta_r$ , calculated basing on the  $S$ -matrix parametrization (2) – (5) and (8) for the  $\alpha+^{208}\text{Pb}$  elastic scattering as a function of energy.



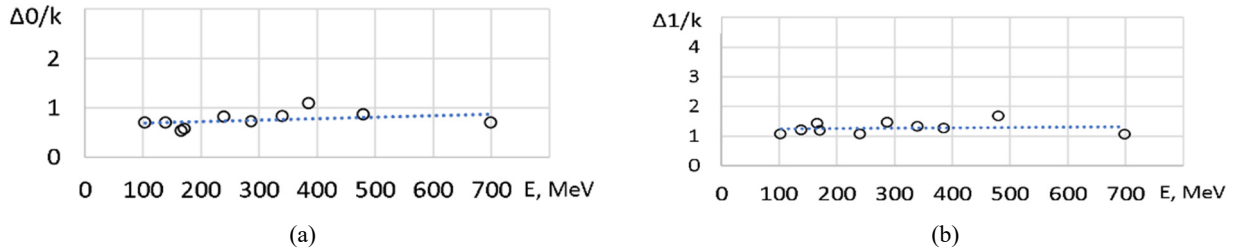
**Figure 16.** Fraunhofer crossover angles  $\theta_{cr}$ , calculated basing on the  $S$ -matrix parametrization (2) – (5) and (8) for the  $\alpha+^{208}\text{Pb}$  elastic scattering, as a function of energy.

The values of boundary radii  $L_0/k$ ,  $L_1/k$  (fm) (Fig. 17) and diffuseness  $d_0 = \Delta_0/k$ ,  $d_1 = \Delta_1/k$  (fm) (Fig. 18) change slowly with increasing energy approximately according to a linear law.

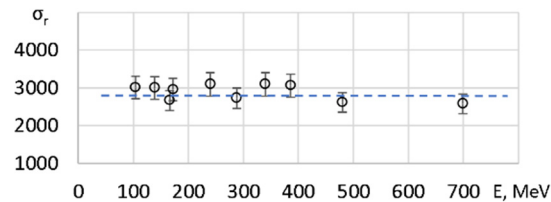
Figure 19 shows that the total reaction cross-sections, calculated by the  $S$ -matrix model in the energy range 104-700 MeV practically do not change within a 10% error.



**Figure 17.** Dependence of the boundary radii  $L_0/k$  (a) and  $L_1/k$  (b) (fm) on the energy.



**Figure 18.** Dependence of the diffuseness parameters  $\Delta_0/k$  (a) and  $\Delta_1/k$  (b) (fm) on the energy



**Figure 19.** Total reaction cross-section  $\sigma_r$  (mb), calculated basing on the  $S$ -matrix parametrization (2)-(5) and (8) for the  $\alpha$ - $^{208}\text{Pb}$  elastic scattering, as a function of energy. The dashed line is drawn horizontally within 10% errors of the experimental data errors

## CONCLUSION

The study of differential cross-sections of the elastic scattering of  $\alpha$ -particles by heavy  $^{208}\text{Pb}$  nuclei in the region of intermediate energies is a source of important information about mechanisms of nuclear interaction, as well as about the absorbing and refractive properties of the nuclear matter.

The completed analysis shows that the proposed six-parameter model of the scattering matrix successfully describes the differential cross-sections of the elastic scattering of  $\alpha$ -particles by heavy  $^{208}\text{Pb}$  nuclei in wide ranges of scattering angles ( $\sim 5$ - $90^\circ$ ) and energies (104-699 MeV) and explains the features of the nuclear rainbow effect in the elastic scattering without numerically solving the Schrödinger equation.

The obtained results of a correct systematic description of the  $\alpha$ - $^{208}\text{Pb}$  elastic scattering cross-sections for the in a wide energy range 104–699 MeV based on the phenomenological model representation of the scattering matrix indicate the presence of strong nuclear refraction in the considered scattering cases and lead to the “nuclear rainbow” interpretation of the analyzed data.

The nuclear rainbow effect has been identified in the differential cross-sections of elastic scattering of  $\alpha$ -particles on the  $^{208}\text{Pb}$  target nucleus for the energies  $E_\alpha = 104, 139, 166, 172, 240, 288, 340, 386, 480,$  and  $699$  MeV, that is in the range of energies 26–175 MeV/nucleon. We have obtained the parameters of the scattering matrix by fitting the experimental data on the  $\alpha$ - $^{208}\text{Pb}$  elastic scattering on the basis of this original  $S$ -matrix approach and have studied the energy systematics of the nuclear rainbow angle and the angle of Fraunhofer crossover of near- and far-side components of the investigated angular distributions of cross-sections. The behavior of the shapes of the quantum deflection function and the modulus of the  $S$ -matrix depending on the energy has also been analyzed. The Fraunhofer crossover angle  $\theta_{cr}$  and the nuclear rainbow angle  $\theta_r$ , depending on the energy, behave as  $\exp(-aE)$ .

We have determined the tendencies of changing the absorbing ( $\varepsilon$ ) and refractive ( $\delta_1$ ) properties of the nuclear matter with the energy change. It has been established that the deflection function remains approximately symmetrical with respect to its minimum in the region of negative values with increasing energy.

The total reaction cross-sections  $\sigma_r$ , calculated on the basis of the parametrized  $S$ -matrix in the energy range 100–700 MeV, taking into account the experimental error of 10%, remain practically unchanged within these data errors.

We can note that with the energy increase the intensity of nuclear refraction  $\delta_1$  decreases approximately as  $\exp(-aE_\alpha)$ , and the nuclear transparency  $\varepsilon$  increases linearly. The boundary radii  $L_{0,1}/k$  and diffuseness parameters

$\Delta_{0,1} / k$  for the strong absorption and nuclear refraction regions have a linear energy dependence. This indicates smooth, physically substantiated changes in the values of the parameters with a change in energy, which have a clear semiclassical interpretation.

A comparative analysis of the fit quality in the  $S$ -matrix and optical-model approaches shows a high quality of the fitting performed with the proposed six-parameter  $S$ -matrix model.

The results of the analysis show that the applied  $S$ -matrix approach may be used for further analyzing a wide variety of refraction phenomena, which are observed in the light-ion elastic scattering processes with heavy target nuclei, and for obtaining information about the interaction between nuclei and the nuclear structure from this analysis, as well as for determining the concrete ratio between the intensities of nuclear absorption, nuclear refraction and Coulomb interaction for investigated nuclear processes.

The investigation results allow the selection of unique nuclear systems and conditions to measure cross-sections of such nuclear processes, which may be sensitive to the studied effect.

#### ORCID IDs

© Yuri Berezhnoy, <https://orcid.org/0000-0002-9192-4801>; © Gennadiy Onyshchenko, <https://orcid.org/0000-0001-6945-8413>  
© Pylyp Kuznietsov, <https://orcid.org/0000-0001-8477-1395>; © Ivan Yakymenko, <https://orcid.org/0000-0002-0194-8376>

#### REFERENCES

- [1] Yu.A. Berezhnoy, and V.V. Pilipenko, "Analysis of refraction effects in nuclear scattering on the basis of the  $S$ -matrix approach", *Mod. Phys. Lett. A*, **10**(3), 2305 (1995). <https://doi.org/10.1142/S0217732395002465>
- [2] Yu.A. Berezhnoy, G.M. Onyshchenko, and V.V. Pilipenko, "Analysis of  $\alpha$ - $^{12}\text{C}$  elastic scattering at intermediate energies by the  $S$ -matrix model", *Int. J. Mod. Phys. E*, **26**(5), 1750027 (2017). <https://doi.org/10.1142/S0218301317500276>
- [3] Yu.A. Berezhnoy, A.S. Molev, G.M. Onyshchenko, and V.V. Pilipenko, "Unified  $S$ -matrix analysis of Airy structures in  $\alpha$ - $^{24}\text{Mg}$  elastic and inelastic scattering", *Int. J. Mod. Phys. E*, **27**(7), 18500611 (2018). <https://doi.org/10.1142/S0218301318500611>
- [4] P. Hodgson, *The Nucleon Optical Model*, (World Scientific, 1994). pp. 423.
- [5] G. Hauser, R. Löhken, H. Rebel, G. Schatz, W. Schweimer, and J. Specht, "Elastic scattering of 104 MeV alpha particles", *Phys. Lett. B*, **27**, 220 (1968). [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(68\)90277-3](https://doi.org/10.1016/0370-2693(68)90277-3)
- [6] D.A. Goldberg, S.M. Smith, H.G. Pugh, P.G. Roos, and N.S. Wall, "Scattering of 139-MeV Alpha Particles by 58Ni and 208Pb", *Phys. Rev. C*, **7**, 1938 (1973). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.7.1938>
- [7] B. Tatischeff, and I. Brissaud, "166-MeV Elastic and Inelastic Alpha-Particle Scattering Macroscopic And Microscopic Analysis", *Nucl. Phys. A*, **155**, 89 (1970). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(70\)90080-1](https://doi.org/10.1016/0375-9474(70)90080-1)
- [8] H.P. Morsch, C. Sükösd, M. Rogge, P. Turek, H. Machner, and C. Mayer-Böricke, "Giant monopole and quadrupole resonances and other multipole excitations in 208Pb studied in 43 MeV/nucleon  $\alpha$ -particle and deuteron scattering". *Phys. Rev. C*, **22**, 489 (1980). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.22.489>
- [9] Do Cong Cuong, Dao T. Khoa, and Gianluca Colò, "Microscopic study of the isoscalar giant resonances in 208Pb induced by inelastic  $\alpha$  scattering", *Nuclear Physics A*, **836**, 11 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2009.12.009>
- [10] B. Bonin, N. Alamanos, B. Berthier, G. Bruge, H. Faraggi, J.C. Lugol, W. Mittig, L. Papineau, A.I. Yavin, J. Arvieux, L. Farvacque, M. Buenerd, and W. Bauhoff, "Alpha-nucleus elastic scattering at intermediate energies", *Nuclear Physics A*, **445**(3), nj-407 (1985). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(85\)90448-8](https://doi.org/10.1016/0375-9474(85)90448-8)
- [11] M. Uchida, H. Sakaguchi, M. Itoh et.al, "Systematics of the bimodal isoscalar giant dipole resonance", *Phys. Rev. C*, **69**, 051301-1 (2004). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.69.051301>
- [12] S.K. Kauffmann, "Refractive damping of Fraunhofer diffraction in light ion-nucleus elastic scattering at high energy", *Z. Phys. A*, **282**(2), 163 (1977). <https://doi.org/10.1007/BF01408160>
- [13] K.W. McVoy, "Regge poles and strong absorption in heavy-ion and  $\alpha$ -nucleus scattering", *Phys. Rev. C*, **3**(3), 1104 (1971).
- [14] R.C. Fuller, "Qualitative behavior of heavy-ion elastic scattering angular distributions", *Phys. Rev. C*, **12**, 1561 (1975). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.12.1561>
- [15] D.R. Dean, and N. Rowley, "Near-side-farside analysis of inelastic heavy-ion scattering", *J. Phys. G*, **10**(4), 493 (1984). <https://doi.org/10.1088/0305-4616/10/4/011>
- [16] R.C. Johnson, "Spin-dependent interactions in nuclear reactions", *J. Phys. Soc. Jpn. (Suppl)*, **55**, 7 (1986).
- [17] J. Knoll, and R. Schaeffer, "Semiclassical scattering theory with complex trajectories. I. Elastic waves", *Ann. Phys*, **97**(2), 307 (1976). [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(76\)90040-3](https://doi.org/10.1016/0003-4916(76)90040-3)

#### АНАЛІЗ ПРУЖНОГО $\alpha$ - $^{208}\text{Pb}$ РОЗСІЯННЯ В ШИРОКОМУ ІНТЕРВАЛІ ЕНЕРГІЙ ЗА $S$ -МАТРИЧНОЮ МОДЕЛЛЮ

Ю. А. Бережний<sup>а</sup>, Г. М. Онищенко<sup>а</sup>, В. В. Пилипенко<sup>б</sup>, П. Е. Кузнєцов<sup>а</sup>, І. І. Якименко<sup>а</sup>

*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, 61022, Харків, Україна,*

*Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут», 61108, Харків, Україна*

У роботі досліджено пружне розсіяння  $\alpha$ -частинок на важких ядрах  $^{208}\text{Pb}$  при енергіях 26-175 МеВ/нуклон з використанням оригінальної шести-параметричної  $S$ -матричної моделі, що враховує сильне поглинання і виражені ефекти заломлення розсіяних хвиль. За допомогою фітінгу експериментальних даних з літератури, виміряних в широкому діапазоні енергій: 104, 139, 166, 172, 240, 288, 340, 386, 480 і 699 МеВ досліджені дифракційні та заломлювальні картини розсіяння. Представлено поведінку знайдених параметрів моделі, а також повного перерізу реакції, кути перетину ближньої та дальньої складових амплітуди розсіювання (фраунгоферів перетин), кути ядерної райдуги, а також наведено порівняння з диференціальними перерізами, розрахованими за оптичною моделлю.

**Ключові слова:** пружне розсіювання; матриця розсіювання;  $4\text{He}+^{208}\text{Pb}$ ; ядерна рефракція; ядерна веселка; кросовер Фраунгофера, мінімум Ейрі, загальний поперечний переріз



## STUDY OF THE NUCLEAR STRUCTURE FOR SOME NUCLEI USING SELF-CONSISTENT RPA CALCULATIONS WITH SKYRME-TYPE INTERACTION†

✉ Noor M. Kareem<sup>a,\*</sup>, ✉ Ali A. Alzubadi<sup>a</sup>

<sup>a</sup>University of Baghdad, College of Science, Department of Physics

\*Corresponding Author: [nour.mohammed1204a@sc.uobaghdad.edu.iq](mailto:nour.mohammed1204a@sc.uobaghdad.edu.iq)

Received September 8, 2022; revised October 11, 2022; accepted October 25, 2022

In the present research, some static and dynamic nuclear properties of the closed-shell nuclei;  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Zr}$ ,  $^{116}\text{Sn}$ , and  $^{144}\text{Sm}$  have been studied using the Random Phase Approximation (RPA) with different Skyrme parameterizations, particularly SyO-, Sk255, SyO+, SLy4, BSk17, and SLy5. In particular, in studies of static properties such as single-particle radial nuclear densities for neutrons, protons, mass, and charge densities with their corresponding root mean square (rms) radii, All the obtained results agreed well with the relevant experimental data. Concerning the dynamic nuclear properties such as, the excitation energy, transition density, and giant resonance modes for the excitation to the low-lying negative parity excited states  $1^-$ ,  $3^-$ ,  $5^-$ , and  $7^-$  have also been studied. The obtained results that estimates of RPA with Skyrme-type interactions are a good way to describe the properties of the structure of even-even, closed-shell nuclei.

**Keywords.** Skyrme Forces, Hartree-Fock (HF), Random Phase Approximation (RPA), Higher Modes Excited State, Skyrme Energy Density.

**PACS:** 14.20.Dh, 21.10.\_k, 21.10.Dr, 21.10.Ft, 21.10.Pc, 21.60.Cs, 21.60.Jz

### INTRODUCTION

The structure of the atomic nucleus is dictated by the interactions of its constituents. Understanding the behavior of multi-degree-of-freedom systems in terms of the fundamental interactions between their constituent components is one of the most difficult challenges in theoretical physics. The theoretical models need to be greatly simplified to find a solution to the problem of many-body in non-relativistic quantum mechanics, which governs self-bound composite systems [1]. When it comes to explaining the structure and dynamical features of nuclei, this is precisely the case [2-4]. A nuclear multi-body issue, which occurs in many disciplines of physics, is notoriously difficult to answer precisely. There are a number of approximate techniques for dealing with such systems. The independent particle approximation is used in the Simple Shell Model (SM), which ignores all correlation effects. The nuclear SM is one of the most important tools for understanding the structure of atomic nuclei and their radioactive decay stability. It is, like the atomic SM, a microscopic approach that calculates the interaction of individual nucleons with a mean-field potential created by each of the system's constituent nucleons [5]. The nuclear shell model is based on the premise that each nucleon (proton or neutron) travels in the average field independently to the first order. RPA based on Hartree-Fock (HF) has been particularly successful in describing collective motion phenomena in nuclei at the microscopic level [6]. The HF and RPA nuclear structure approaches are widely regarded as highly successful in designing the ground states and excitations of spherical nuclei with effective interactions that are density-dependent [7]. The categorization of excitation modes is contingent upon the process by which a nucleus is excited [8].

In the present, the static and dynamic nuclear properties of some closed-shell nuclei, such as  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Zr}$ ,  $^{116}\text{Sn}$ , and  $^{144}\text{Sm}$  nuclei, were investigated using a basis on Skyrme-type interactions and the self-consistent HF- RPA, SyO+, SyO-, Sk255, SLy4, BSk17, and SLy5. In particular, the charge, neutron, proton, and mass densities associated with root mean square radii (rms) In addition, excitation energy, transition densities, and strength functions for the transition to negative parity states are also included. The estimated result will be compared with the available experimental data. In these nuclei, giant resonance (GR) modes and transition densities were also detected, indicating that the nucleus is moving collectively.

### THEORETICAL CONSIDERATION

#### Hartree-Fock Method

The "self-consistent field" approach was invented by Hartree, which he developed shortly after the formulation of the Schrödinger equations, to approximate the calculation of the wave functions and energy of atoms using the wave function of a single particle, which may be thought of as a combination of many-body wave functions [9]. Using variational principles, the HF equations can be obtained [10]. The variational principle is a method for calculating the wave functions and bound-state energies of a time-independent Hamiltonian [11]. Calculations for closed-shell nuclei were performed using the density-dependent nucleon-nucleon interaction of Skyrme [12]. Which of the following is regarded as a Slater determinant for the single-particle state:

$$\varphi_{\beta}(x_1, x_2, \dots, x_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det |\varphi_{\beta}(x_j)| \quad (1)$$

where is the set of space  $\vec{r}$ ,  $\sigma$  spin, and  $q$  isospin coordinate, A is the number of sets.

† Cite as: N.M. Kareem, and A.A. Alzubadi, East Eur. J. Phys. 4, 57 (2022), <https://doi.org/10.26565/2312-4334-2022-4-04>  
© N.M. Kareem, A.A. Alzubadi, 2022

The integral of the Hamiltonian density H can be used to expectation the Slater determinant total Hamiltonian's (H) expectation value:

$$\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle = \int \hat{H}(\vec{r}) d\vec{r} \tag{2}$$

Regarding the HF wave function, the predicted value of the whole Hamiltonian is used to estimate the ground-state energy in the HF approach [11].

$$\begin{aligned} E_{HF}^0 &= \langle \Phi_{HF} | \hat{H} | \Phi_{HF} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^A \int \phi_i^*(\vec{r}) \nabla^2 \phi_i(\vec{r}) d\vec{r} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^A \iint \phi_i^*(\vec{r}) \phi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \phi_i(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}' \\ &- \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^A \iint \phi_i^*(\vec{r}) \phi_j^*(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \phi_i(\vec{r}') \phi_j(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{r}' \end{aligned} \tag{3}$$

The HF equations are simplified [11].

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi_i(\vec{r}) + U_H^{(i)}(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) - \int U_F^{(i)}(\vec{r}, \vec{r}') \Phi_i(\vec{r}') d\vec{r}' = \epsilon_i \Phi_i(\vec{r}) \tag{4}$$

With the addition of a non-local term, it resembles the ordinary one-body Schrödinger equation. The ground state Slater determinant, also known as the solution of the wave function matrix of a single particle, may be used to derive a sequence of one-body densities.

### Skyrme-Type Interaction

The Skyrme interaction was developed for nuclear structure computations based on the idea that the energy functional could be rescaled and written as a zero-range expansion. As a result, the HF equations may be inferred easily by exchanging terms with the same mathematical structure as direct terms. Since Brink and Vautherin's pioneering work [13]. The Skyrme interaction is defined as the sum of two and three body components [14]. It is possible to express the interaction between two nucleons with  $\mathbf{r}_1$  and  $\mathbf{r}_2$  spatial coordinates in the standard form [15]:

$$\begin{aligned} V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= t_0 (1 + x_0 \hat{P}_\sigma) \delta_{12} + \frac{t_1}{2} (1 + x_1 \hat{P}_\sigma) [\delta_{12} \bar{k}^2 + \delta_{12} k'^2] + \\ &t_2 (1 + x_2 \hat{P}_\sigma) \hat{k}' \delta_{12} \hat{k} + \frac{t_3}{6} (1 + x_3 \hat{P}_\sigma) \rho^\alpha \left( \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right) \delta_{12} + \\ &iW_0 (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) [\hat{k}' \times \delta_{12} \hat{k}] \end{aligned} \tag{5}$$

where,  $\delta_{12} = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  is the interaction Dirac delta function [16],  $\sigma$  are the Pauli spin matrices and  $\hat{P}_\sigma = (1 + \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2)/2$  is the spin exchange operator, while  $\hat{k}'$  and  $\hat{k}$  are the operators for relative momentum.  $k'$  acting on the right and  $k$  acting on the left. They are defined as follows:  $\hat{k}' = -\frac{1}{2i}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)$  and  $\hat{k} = \frac{1}{2i}(\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)$ .

The free parameters  $t_1, t_0, t_3, t_2, x_0, x_1, x_2, x_3$ , and  $W_0$ , to produce the experimental data obtained from a limited number of nuclei, including binding energies as well as rms radii, are combined with the theory of nuclear matter properties.

### Skyrme Energy Density

The Skyrme energy density functional, which is a function of various densities, can be calculated using the conventional Skyrme force [15]. The integral of the Hamiltonian density H can be used to calculate the probability value for the total Hamiltonian (H) of the Slater determinant:

$$E[\rho] = \langle \psi | T + V_{\text{Skyrme}} | \psi \rangle = \int d^3r E(\mathbf{r}). \tag{6}$$

The Hamiltonian operator can be expressed as a sum of terms representing various aspects of the force [15]:

$$\hat{H} = \hat{H}_{kin} + \hat{H}_0 + \hat{H}_3 + \hat{H}_{eff} + \hat{H}_{fm} + \hat{H}_{so} + \hat{H}_{sg} + \hat{H}_{Coul} \tag{7}$$

### Skyrme-Hartree-Fock Equations

It's difficult to represent the system's energy as a function of the standard density matrix using the Skyrme interaction because of the dependence on  $J$ . In this situation, the energy must be adjusted with single-particle wave functions, with the additional stipulation that the  $\phi_k$  is normalized [17].

$$\delta \left[ E - \sum_i \varepsilon_i \int d^3r |\phi_i(r)|^2 \right] = 0, \quad (8)$$

$$\delta E = \sum_q \int d^3r \left[ \frac{\hbar^2}{2m_q^*} \delta \tau_q(r) + U_q(r) \delta \rho_q(r) + w_q(r) \delta J_q(r) \right], \quad (9)$$

where the coefficients of the variation are,

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*} = \frac{\delta E}{\delta \rho_q} = \frac{\hbar^2}{2m_q} + \frac{1}{8} [t_1(2+x_1) + t_2(2+x_2)] \rho + \frac{1}{8} [t_2(2x_2+1) - t_1(2x_1+1)] \rho_q, \quad (10)$$

$$U_q = \frac{\delta E}{\delta \rho_q} = \frac{1}{2} t_0 [(2+x_0) - \rho(2x_0+1)] + \frac{1}{24} t_3 \alpha \rho^{\alpha-1} [(2+x_3) \rho^2 - (2x_3+1)(\rho_p^2 + \rho_n^2)] \\ + \frac{1}{12} t_3 \rho^\alpha [(2+x_3) \rho - (2x_3+1) \rho_q] + \frac{1}{8} [t_1(2+x_1) + t_2(2+x_2)] \tau + \frac{1}{8} [t_2(2x_2+1) - t_1(2x_1+1)] \tau_q, \quad (11)$$

$$- \frac{1}{16} [3t_1(2+x_1) - t_2(2+x_2)] \nabla^2 \rho + \frac{1}{16} [3t_1(2x_1+1) + t_2(2x_2+1)] \nabla^2 \rho_q - \frac{1}{2} W_0 [\nabla J + \nabla J_q] + \delta_1 q V_C$$

$$W_q = \frac{\delta E}{\delta J_q} = \frac{1}{2} W_0 [\nabla \rho + \nabla \rho_q] - \frac{1}{8} (t_1 x_1 + t_2 x_2) J + \frac{1}{8} (t_1 - t_2) J_q, \quad (12)$$

assuming a spherical closed-shell nucleus. As a result, the SHF radial equations can be deduced [18] which give can be deduced.

$$\frac{\hbar^2}{2m_q^*(r)} \left[ -u'_q(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} u_q(r) \right] - \frac{d}{dr} \left( \frac{\hbar^2}{2m_q^*(r)} \right) u'_q(r) \\ + \left\{ U_q(r) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( \frac{\hbar^2}{2m_q^*(r)} \right) + \left( j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \frac{W_q(r)}{r} \right\} u_q(r) = \varepsilon_a u_q(r) \quad (13)$$

### The Random Phase Approximation

RPA is commonly regarded as a suitable method for studying nuclear structure since it provides an effective formalism for describing numerous giant resonances or excitations caused by low-lying particle holes, which are examples of nuclear excitations [19]. This theory can be used to describe the properties of low-energy excited states [20]. The straightforward HF Slater-determinant of the Schrödinger equation for this situation is [21].

$$\hat{H} |v\rangle = E_v |v\rangle, \quad (14)$$

The so-called creation operators  $Q_v^\dagger$  can be employed to express the eigenvectors  $|v\rangle$ .

$$|v\rangle = Q_v^\dagger |0\rangle, \quad (15)$$

where  $|0\rangle$ , the ground state, is also known as the vacuum.

In the RPA, we can generate and annihilate  $p$ - $h$  pairs; the real ground state is not merely the HF vacuum [21].

$$Q_v^\dagger(JM) = \sum_{ab} X_{ab}^{v*} A_{ab}^\dagger(JM) - Y_{ab} \tilde{A}_{ab}^\dagger(JM). \quad (16)$$

Hermitian conjugation yields the following annihilation operator:

$$Q_v = \sum_{ab} X_{ab}^{v*} A_{ab}(JM) - Y_{ab} \tilde{A}_{ab}^\dagger(JM). \quad (17)$$

The state's excitation energy  $|v\rangle$  and the correlation matrix  $\hbar w_v = E_v - E_0$  are combined into one matrix equation [21].

$$\begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{(v)} \\ Y_{(v)} \end{pmatrix} = \hbar w_v \begin{pmatrix} X_{(v)} \\ Y_{(v)} \end{pmatrix}. \tag{18}$$

If the size of the  $p$ - $h$  configuration space is  $N$ , the matrices elements. The sub matrices  $B$  and  $A$  are formed from the particle-hole configurations, where matrix  $A$  is Hermitian and the correlation matrix  $B$  is symmetric [22]. With the use of a multipole, transition density characterizes the connection between each excited state and the ground state. A transition is a generated amplitude for the operator. It is possible to compute its transition density's radial component. It has the definition below [23]:

$$\delta\rho_v(\vec{r}) = \langle v | \hat{\rho}(\vec{r}) | 0 \rangle = \delta\rho_v(r) \psi_{(JM)}^*(\hat{r}). \tag{19}$$

Below is the description of the density of state radial transition [23].

$$\delta\rho_v = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \sum_{mi} [X_{mi}^{(v)} + Y_{mi}^{(v)}] \langle m || Y_J || i \rangle \frac{u_m(r) u_i(r)}{r^2}, \tag{20}$$

Excitation characteristics such as volume or surface type can be revealed through transition densities. The transition density for neutrons and protons is given as it can be either an isoscalar (IS) ( $T = 0$ ) or an isovector (IV) ( $T = 1$ ) [23]:

$$\delta\rho_v^{IS}(r) = \delta\rho_{vn}(r) + \delta\rho_{vp}(r); \Delta T = 0, \tag{21}$$

$$\delta\rho_v^{IV}(r) = \delta\rho_{vn}(r) - \delta\rho_{vp}(r); \Delta T = 1. \tag{22}$$

In general, spherical harmonics related sum rule features can be enlarged in IS and IV external fields (F). It is possible to compute it using [23]. It can be calculated from:

$$\widehat{F}_J^{(IV)} = \sum_{i=1}^4 f_J(\vec{r}_i) Y_{JM}(\vec{r}_i)(\tau_z), \tag{23}$$

$$\widehat{F}_J^{(IS)} = \sum_{i=1}^4 f_J(\vec{r}_i) Y_{JM}(\vec{r}_i). \tag{24}$$

The IS and IV giant resonances' strength function distributions  $S(E)$  have been discovered to be extremely sensitive to nuclear matter's physical characteristics. The strength function of low-lying energy could be calculated by using the following:

$$S(E) = \sum_v \langle v || \widehat{F}_J || 0 \rangle^2 \delta(E - E_v). \tag{25}$$

When the sum rule characteristics of generic IS and IV external fields are connected [23]. We can calculate the energy moments by integral the strength function,  $S(E)$ .

$$m_k = \int_{E_1}^{E_2} E^k S(E) dE. \tag{26}$$

where  $E_1$  and  $E_2$  are the excitation energy limits. The energy moments can be calculated using the formula integrating the strength function  $S(E)$ . These densities can be used for calculating the rms radius of neutrons, protons, charge, and mass distributions [13], [24]:

$$r_q = \langle r_q^2 \rangle^{\frac{1}{2}} = \left[ \frac{\int r^2 \rho_q(r) dr}{\int \rho_q(r) dr} \right]^{\frac{1}{2}}. \tag{27}$$

The proton radius is used to determine the charge radius [22].

$$\langle r_{ch}^2 \rangle = \langle r_p^2 \rangle + \langle r \rangle_p^2, \tag{28}$$

where the proton's rms charge radius is 0.8 fm. The neutron skin thickness  $t$  is calculated using the difference in rms radii between the proton and the neutron. This difference provides information on the structure of nuclei [13].

$$\Delta r_{np} = \langle r^2 \rangle_n^{\frac{1}{2}} - \langle r^2 \rangle_p^{\frac{1}{2}}. \tag{29}$$

## RESULTS AND DISCUSSION

### The Nuclear Ground State Properties

The ground state nuclear properties of an HF, such as the charge density distribution rms, and the binding energies per nucleon and neutron skin thickness, were calculated and compared using several Skyrme parameterizations: Sk255,

BSk17, SyO+, SyO-, SLy4 and SLy5. These parameterizations are described in tabulated 1. Tables (2–5) show the calculated static nucleon properties for the closed-shell nuclei chosen using these parameterizations in conjunction with experimental data from Refs. [25,26]. In the microscopic model, the radius values have risen from 3.7 fm (for  $^{58}\text{Ni}$ ) to 4.9 fm (for  $^{144}\text{Sm}$ ). And the binding energies per nucleon are in the range (8.68.26) MeV. This means that the binding energy per particle is nearly 8 MeV. From the tabulated results, it is clear that charge rms radius values in BSk17 parameterization are the closest to experimental data for  $^{58}\text{Ni}$  and  $^{116}\text{Sn}$  followed by the results of SyO+ for  $^{90}\text{Zr}$  and SLy5 for  $^{144}\text{Sm}$ .

The nuclear charge densities provide a description of a nucleus' interior structure. Fig. 1 depicts the estimated HF radial charge density distribution for a single particle for  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Zr}$ ,  $^{116}\text{Sn}$ , and  $^{144}\text{Sm}$ , respectively. A comparison was made with the available experimental data  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Zr}$ ,  $^{116}\text{Sn}$ , and  $^{144}\text{Sm}$ , respectively. A comparison was made with the experimental data [27,28] except for  $^{116}\text{Sn}$ , for which no available experimental data exists. The  $^{58}\text{Ni}$  results are in complete good agreement with experimental data using SLy5, SLy4, BSk17, SyO- and SyO+ parameterizations. However, the Sk255 results are comparable to experimental evidence but do not fit within the nucleus. For  $^{90}\text{Zr}$ , the SLy4, BSk17, SLy5, and Sk255 parameterizations coincide quite well. However, the results for SyO+ and SyO- are close to the experimental data but don't fit inside the nucleus. For  $^{116}\text{Sn}$  Sk255, BSk17, SyO+, SLy5, SLy4, and SyO-parameterizations, although the findings are comparable to experimental data, they do not fit inside the nucleus. Consideration must also be given to the fact that nucleons possess intrinsic electromagnetic structure. Therefore, the proton, neutron, and mass density profiles must be computed. The profile of every nuclear density type of each of the chosen nuclei is shown in Fig. 2. Examining these curves demonstrates that the nuclear charge distribution density is depends on the rms radius, which rises as the number of protons in each nucleus increases. As the nucleus radius rose for  $^{144}\text{Sm}$ , the density distributions for mass, charge, proton, and neutron increased. While in  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Zr}$ , and  $^{116}\text{Sn}$ , the charge density distributions gradually declined as the nucleus' radii shrank. From Tables (2–5), it is evident that the energy per nucleon for all nuclei match with experimental data, particularly when the SLy5 and SLy4 parameterizations are used. In Figs. (3, 4), the theoretical rms charge radii and the binding energies per nucleon for closed-shell nuclei are compared with experimental data from Refs. [25], [26]. Very good agreement with experiments is seen, especially when Skyrme parameterization is used.

**Table 1.** The Skyrme parameterizations used in the present work.

Parameters	BSk17 [29]	Sk255 [30]	SyO+[31]	SyO-[31]	SLy4 [15]	SLy5 [15]
$t_0$ (MeV fm <sup>3</sup> )	-1837.33	-1689.35	-2099.419	-2103.653	-2488.91	-2484.88
$t_1$ (MeV fm <sup>5</sup> )	389.102	389.3	301.531	303.352	486.82	483.13
$t_2$ (MeV fm <sup>5</sup> )	-3.1742	-126.07	154.781	791.674	-546.390	-549.40
$t_3$ (MeV fm <sup>3+3<math>\alpha</math></sup> )	11523.8	10989.6	13526.464	13553.252	13777.0	13763.0
$x_0$	0.411377	-0.1461	-0.029503	-0.210701	0.834	0.778
$x_1$	-0.832102	0.116	-1.325732	-2.810752	-0.344	-0.328
$x_2$	49.4875	0.0012	-2.323439	-1.461595	-1.0	-1.0
$x_3$	0.654962	-0.7449	-0.147404	-0.429881	1.354	1.267
$w_0$ (MeV fm <sup>5</sup> )	145.885	95.39	287.79	353.156	123.0	126.0
$w'_0$ (MeV fm <sup>5</sup> )	145.885	95.39	-165.7776	-397.498	123.0	126.0
$A$	0.3	0.3563	0.25	0.25	0.1666666	0.1666666

**Table 2.** The calculated binding energy per nucleon, neutron, proton, mass, charge radii, and also the neutron skin thickness ( $t_n$ ), for  $^{58}\text{Ni}$  by using different Skyrme parameterizations.

Force	Rn(fm)	Rp(fm)	Rm(fm)	Rc(fm) Theo.	$t_n$ (fm)	Rc(fm) Exp. [25]	B/A(MeV) Theo.	B/A(MeV) Exp. [26]
BSk17	4.2669	4.2017	8.4686	4.2764	0.0652	4.2694	-8.9177121	-8.710
Sk255	4.3104	4.2024	8.5128	4.2771	0.108		-8.9674868	
SyO+	4.2785	4.1674	8.4459	4.2427	0.1111		-8.8412684	
SyO-	4.3010	4.1651	8.4661	4.2405	0.1359		-8.8117009	
SLy5	4.2871	4.2211	8.5082	4.2955	0.066		-8.7051038	
SLy4	4.2875	4.2251	8.5126	4.2994	0.0624		-8.7320496	

**Table 3.** The calculated binding energy per nucleon, neutron, proton, mass, charge radii, and also the neutron skin thickness ( $t_n$ ), for  $^{90}\text{Zr}$  by using different Skyrme parameterizations.

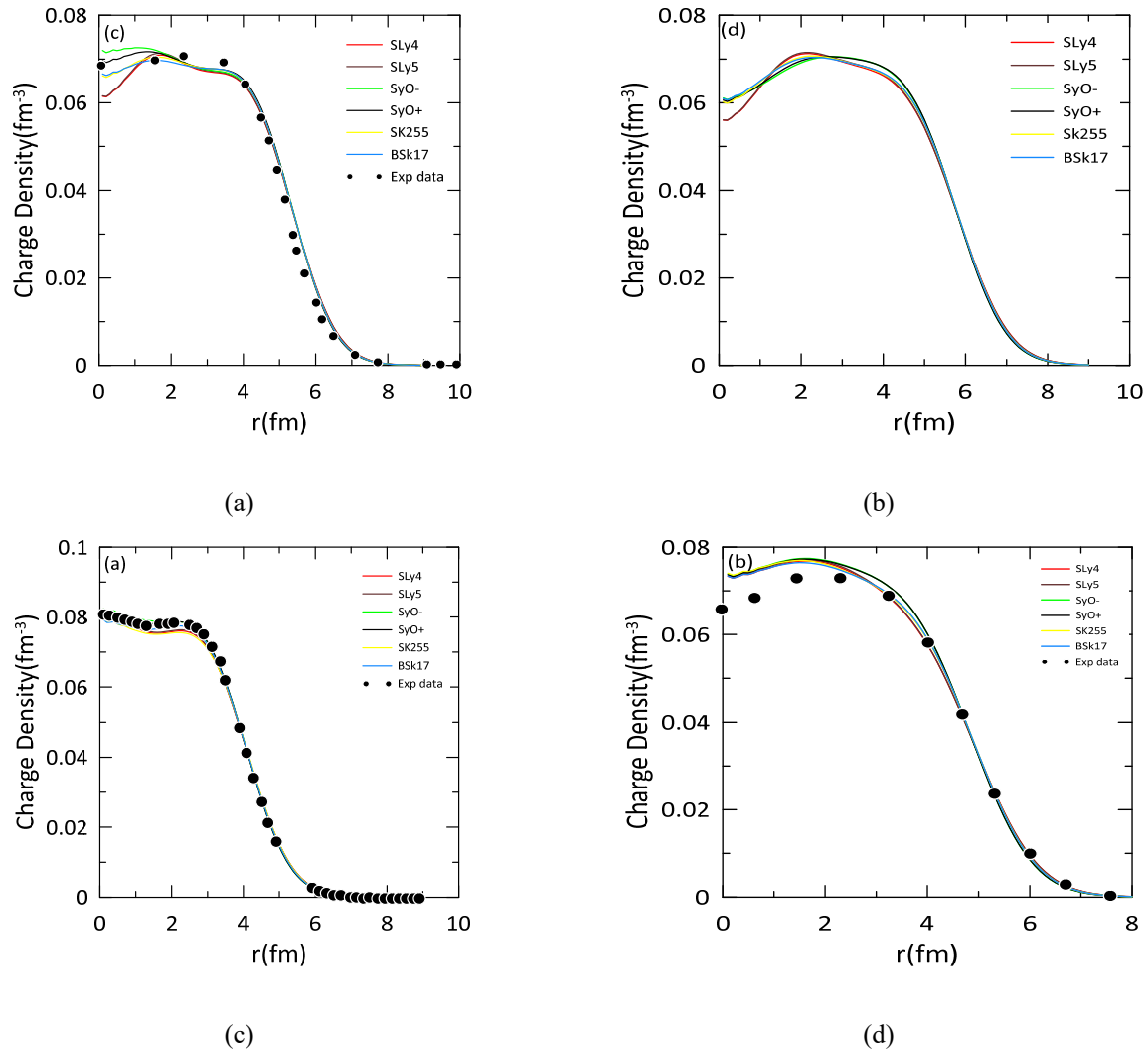
Force	Rn(fm)	Rp(fm)	Rm(fm)	Rc(fm) Theo.	$t_n$ (fm)	Rc(fm) Exp. [25]	B/A(MeV) Theo.	B/A(MeV) Exp. [26]
BSk17	3.6890	3.6923	7.3813	3.7771	-0.0033	3.7757	-8.9121212	-8.732
Sk255	3.7272	3.7172	7.4444	3.8015	0.01		-8.8322377	
SyO+	3.6812	3.6730	7.3542	3.7583	-0.0082		-8.8506103	
SyO-	3.6780	3.6713	7.3493	3.7565	0.0067		-8.8691517	
SLy5	3.7097	3.7114	7.4211	3.7957	-0.0017		-8.6936665	
SLy4	3.7128	3.7159	7.4287	3.8001	-0.0031		-8.7065109	

**Table 4.** The calculated binding energy per nucleon, neutron, proton, mass, charge radii, and. also the neutron skin thickness (tn), for  $^{116}\text{Sn}$  by using different Skyrme parameterizations.

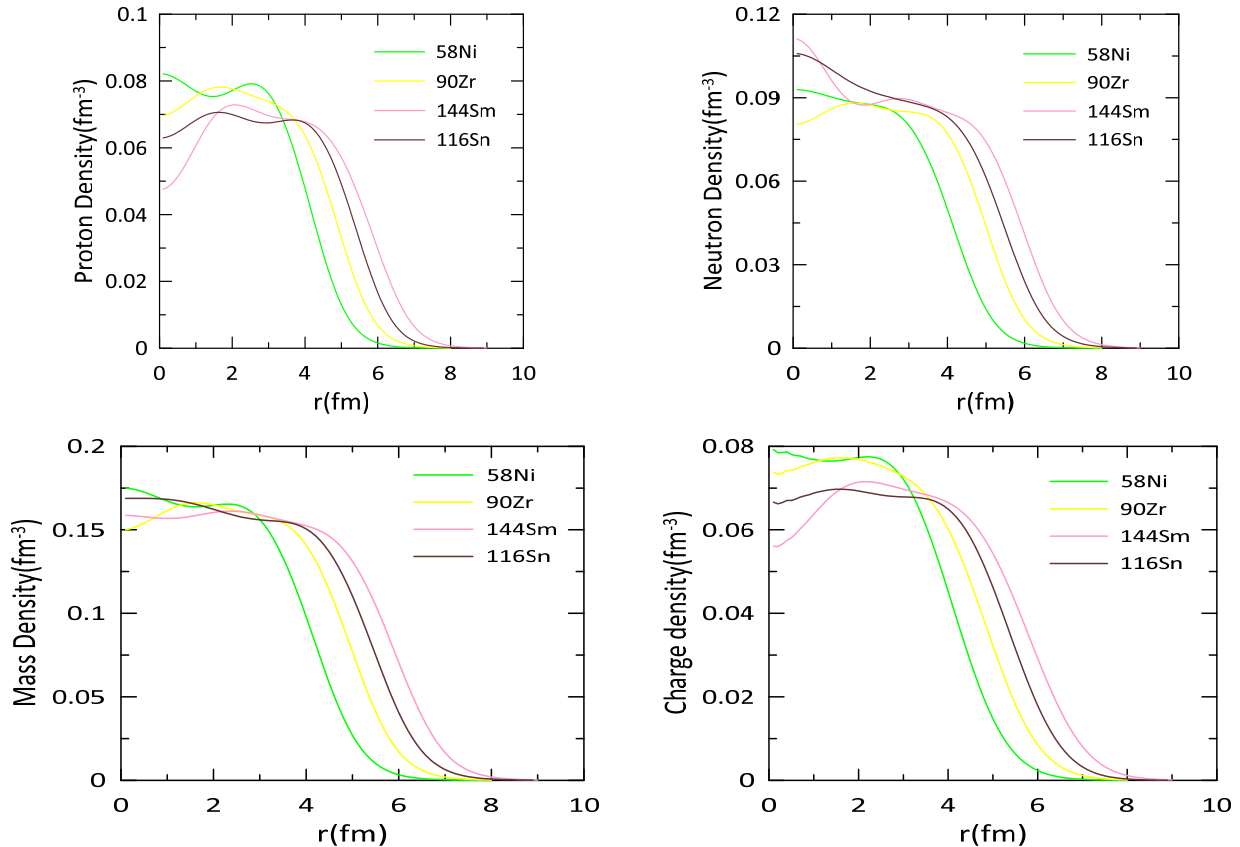
Force	Rn(fm)	Rp(fm)	Rm(fm)	Rc(fm) Theo.	tn(fm)	Rc(fm) Exp. [25]	B/A(MeV) Theo.	B/A(MeV) Exp. [26]
BSk17	4.6403	4.5458	9.1861	4.6150	0.0945	4.6250	-8.6701555	-8.523
Sk255	4.6933	4.5440	9.2373	4.6132	0.1493		-8.7335998	
SyO+	4.6364	4.5294	9.1658	4.5988	0.107		-8.6147510	
SyO-	4.6480	4.5364	9.1844	4.6057	0.1116		-8.6209021	
SLy5	4.6593	4.5620	9.2213	4.6310	0.0673		-8.4741056	
SLy4	4.6636	4.5668	9.2304	4.6356	0.0968		-8.4858585	

**Table 5.** The calculated binding energy per nucleon, neutron, proton, mass, charge radii, and. also the neutron skin thickness (tn), for  $^{144}\text{Sm}$  by using different Skyrme parameterizations.

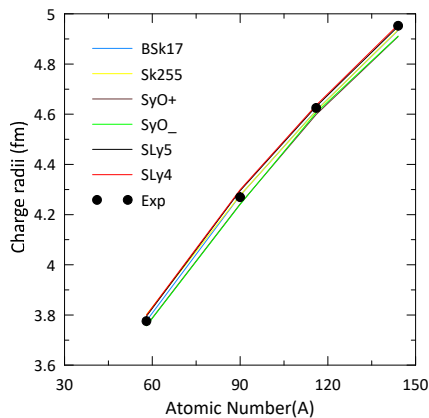
Force	Rn(fm)	Rp(fm)	Rm(fm)	Rc(fm) Theo.	tn(fm)	Rc(fm) Exp. [25]	B/A(MeV) Theo.	B/A(MeV) Exp. [26]
BSk17	4.9436	4.8697	9.8133	4.9343	0.0739	4.9524	-8.4640657	-8.304
Sk255	5.0028	4.8717	9.8745	4.9363	0.1311		-8.5106563	
SyO+	4.9585	4.8443	9.8028	4.9092	0.1142		-8.3523560	
SyO-	4.9792	4.8463	9.8255	4.9112	0.1329		-8.3412634	
SLy5	4.9620	4.8853	9.8473	4.9497	0.0767		-8.2672154	
SLy4	4.9659	4.8920	9.8579	4.9564	0.0739		-8.2278044	



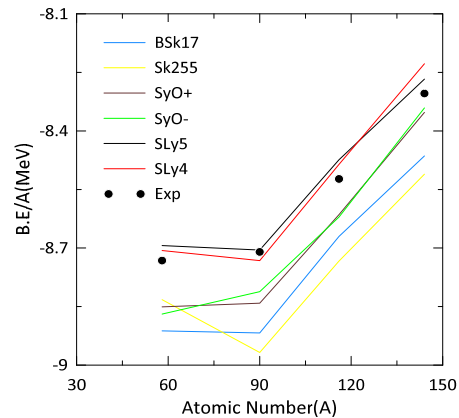
**Figure 1.** The calculated charge density distribution profiles of the magic nucleus (a)  $^{58}\text{Ni}$ , (b)  $^{90}\text{Zr}$ , (c)  $^{116}\text{Sn}$ , and (d)  $^{144}\text{Sm}$  in comparison with known experimental results (closed dots) collected from Refs. ( $^{58}\text{Ni}$  and  $^{90}\text{Zr}$ ) [27], ( $^{116}\text{Sn}$ ) [28].



**Figure 2.** Calculated of proton, mass, neutron, and charge density distributions for closed-shell nuclei  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Zr}$ ,  $^{116}\text{Sn}$  and  $^{144}\text{Sm}$  using SCRPA



**Figure 3.** The Nuclear root-mean-square(rms) charge radii for closed shell nuclei as a function of nucleon number A, compared with data from experimental Ref. [25]

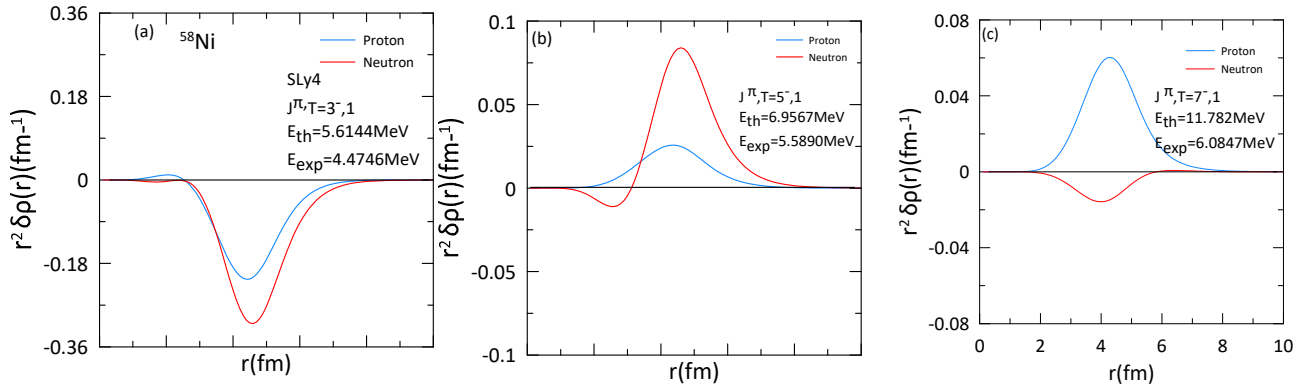


**Figure 4.** Nuclear B.E/A for closed shell nuclei as a function of nucleon number A, compared with data from experimental Ref. [26]

### The Excited States Properties

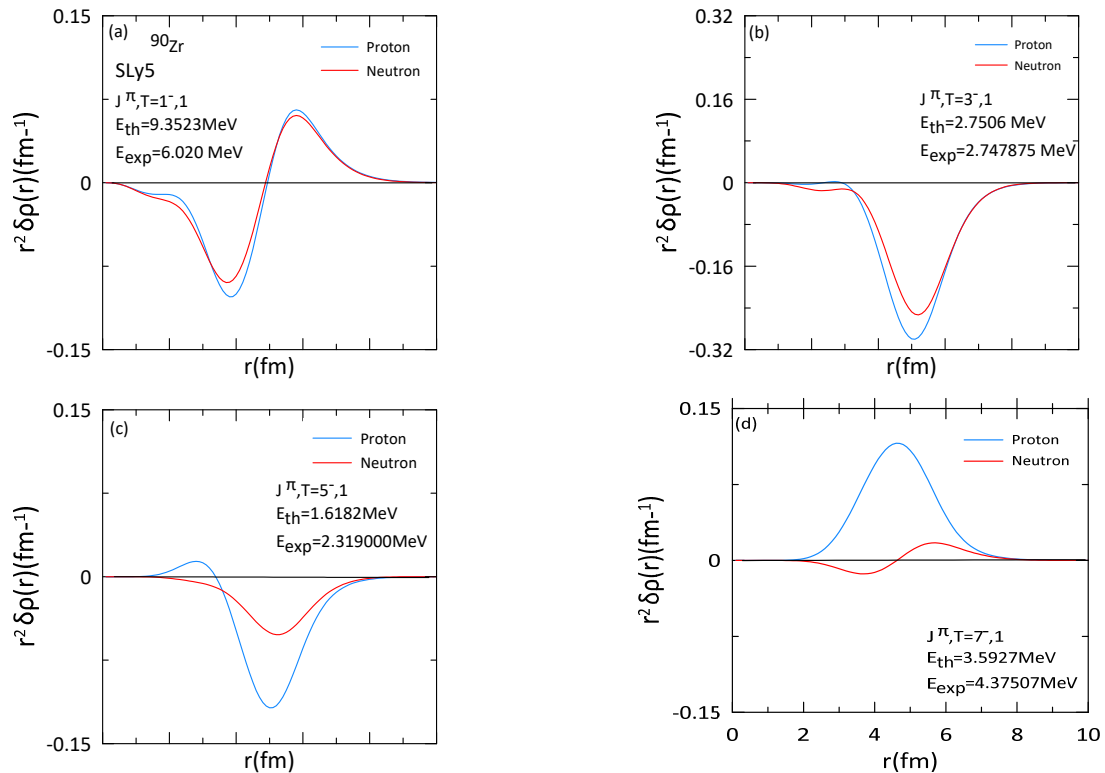
RPA calculations were widely utilized to describe the transition densities of the proton and neutron as well as GRs modes. This technique classifies collective resonances of various multiplicities, like the giant dipole photon absorption cross-section multipole at rank 2, referred to as isoscalar giant dipole resonance (ISGDR), rank 3 is giant octupole resonance (GOR), rank 5 is giant triacontadipole resonance (GTR), and rank 7 is giant octacosahexapole resonance (GOCR). In addition, the relation between the IV and IS strength functions and also the excitation energy functions has been defined, as have multipole excitations characterized by p-h pairings in which the particles and hole states are slightly below and above the Fermi surface. For optimum results, SLy5 and SLy4 parameterizations were chosen for this purpose based on the best binding energy estimates compared with experimental data [26].

**Transition density calculation.** For collective electric excitations, the transition density is useful for the low-lying excited states for nuclei  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Zr}$ ,  $^{116}\text{Sn}$  and  $^{144}\text{Sm}$ , The radial transition densities of protons and neutrons for the RPA state are shown in Figs. (5–12).



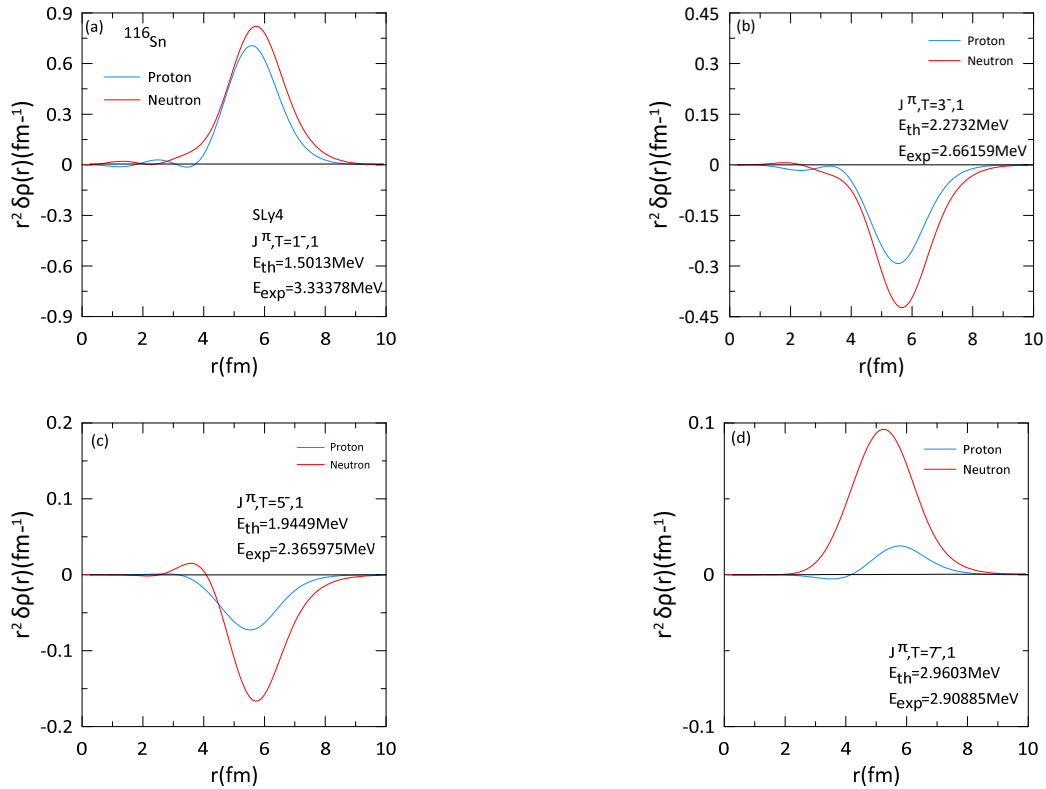
**Figure 5.** The radial transition densities of protons and neutrons for the negative parity state are shown for  $^{58}\text{Ni}$  (a)  $3^-$ , (b)  $5^-$  and (c)  $7^-$  using RPA with SLy4 Skyrme parameterization. The energy of excitation was compared with experimental data taken from Ref. [33]

Compared to the existing experimental data, the estimated excitation energy of the negative parity excited states is qualitatively consistent with the results of the experiments ( $^{90}\text{Zr}$  has state  $3^-$ (2.747875MeV),  $^{116}\text{Sn}$  has states  $3^-$ (2.66159MeV) and  $7^-$ (2.90885MeV), and  $^{144}\text{Sm}$  has state  $5^-$ (2.82517MeV)). There is a small difference between theoretical values and experimental data for ( $^{58}\text{Ni}$  with states  $3^-$ (4.971MeV) and  $5^-$ (5.5890MeV)), ( $^{90}\text{Zr}$  with states  $5^-$ (2.319000MeV) and  $7^-$ (4.037507MeV)), ( $^{116}\text{Sn}$  with state  $1^-$ (6.020MeV)), and ( $^{144}\text{Sm}$  with state  $7^-$ (3.12407MeV)) and a significant difference for ( $^{58}\text{Ni}$  with state  $7^-$ (6.00847MeV)) and ( $^{90}\text{Zr}$  with state  $1^-$ (6.020 MeV)). The associated transition densities effectively represent density oscillations around the ground state configuration. It is a crucial characteristic that sheds light on the nature of nuclear excitations in excited states, which determine protons and neutrons responses to external disturbance to obtain a simple estimation of the collectivity shown by the various dipole responses. It is shown that protons and neutrons can vibrate either in the skin mode's IS phase, where protons oscillate against neutrons, or in phase IV, which is the opposite (pn mode). Furthermore, the IV characterization is crucial for describing the motion of the neutron and proton within the nucleus, as it appears the peaks for proton and neutron transition densities appear to be positive for both protons and neutrons. The quantum numbers identifying these p-h pairs' SP states are identical. The electric multipole excitations ( $J^\pi = 1-, 3-, 5-, 7-$ ) emphasize this section of the current work. GR states are classified using the spin S, isospin T transmitted and total angular momentum J, as a result of nuclear ground state excitation. The scope of this study was confined to electric IS resonance with  $S = 0$  and  $T = 0$ . Electric IV resonance takes place when  $S = 1$  and  $T = 1$ .

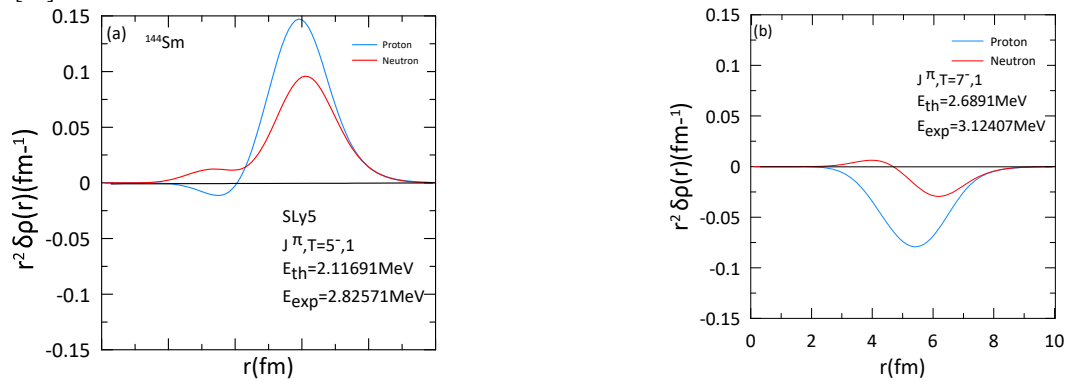


**Figure 6.** Same as Fig. 5 but using RPA with SLy5 Skyrme parameterization. For  $^{90}\text{Zr}$  nucleus (a)  $1^-$ , (b)  $3^-$ , (c)  $5^-$  and (d)  $7^-$ .

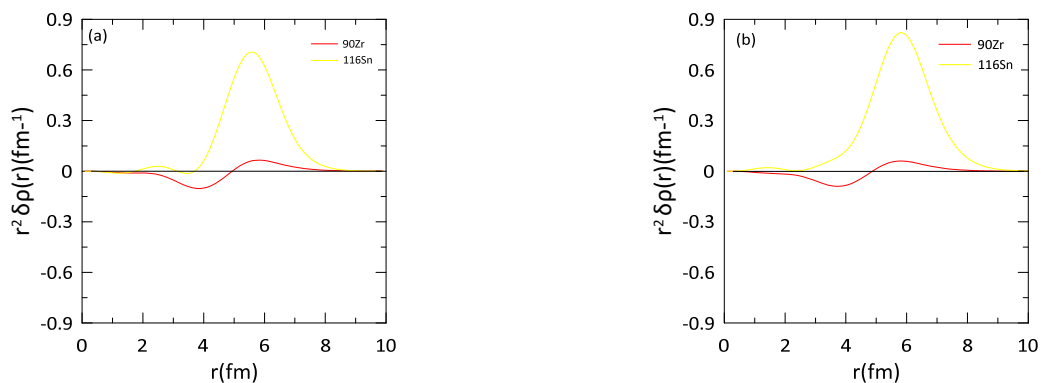




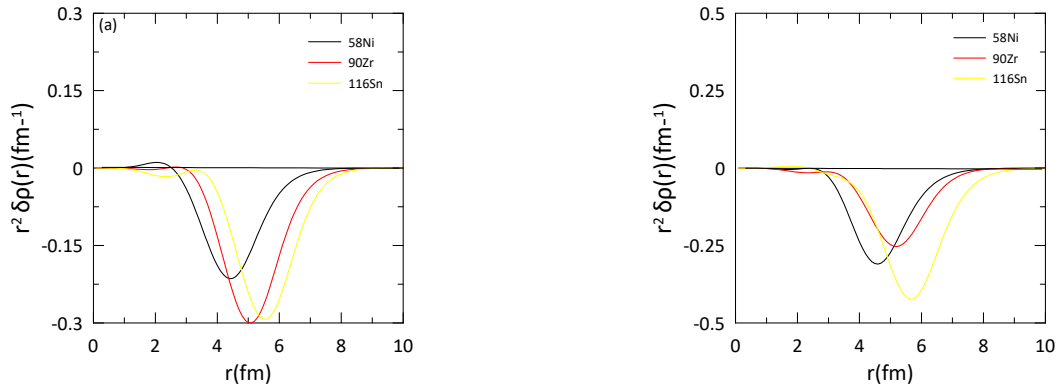
**Figure 7.** The radial transition densities of protons and neutrons for the negative parity state are shown for  $^{116}\text{Sn}$  (a)  $3^-$ , (b)  $5^-$  and (c)  $7^-$  using RPA with SLy4 Skyrme parameterization. The energy of excitation was compared to the experimental results obtained from Ref. [33]



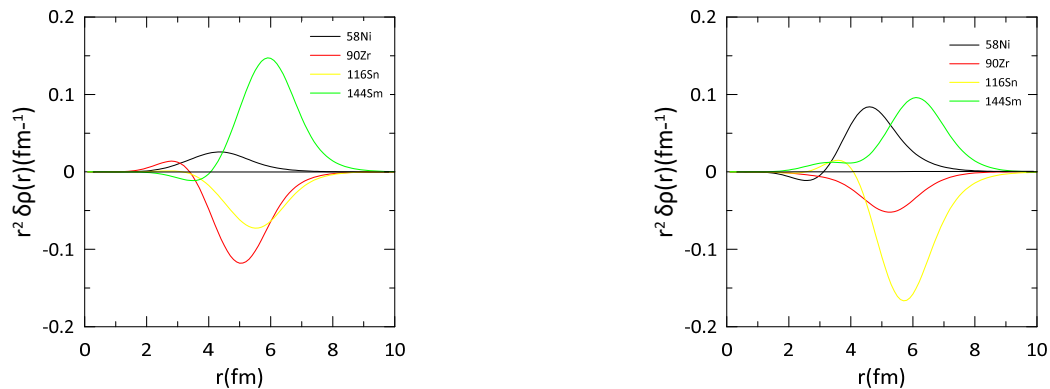
**Figure 8.** Same as Fig. 7 but using RPA with SLy5 Skyrme parameterization. For  $^{144}\text{Sm}$  nucleus (a)  $5^-$ , and (b)  $7^-$



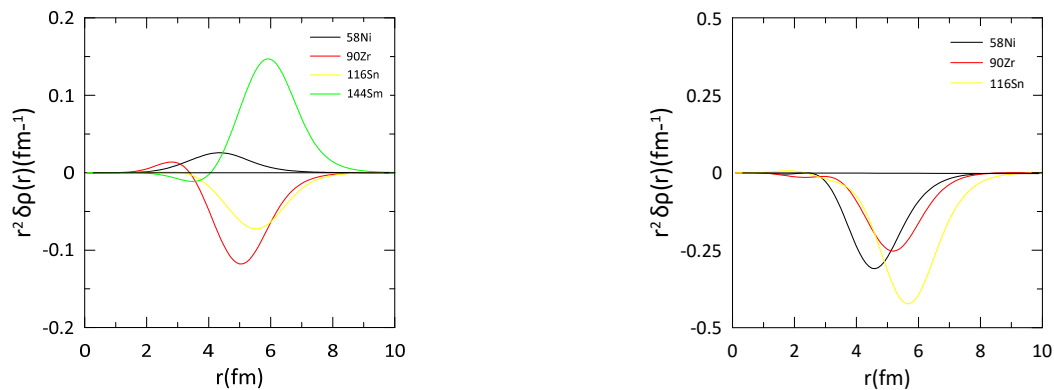
**Figure 9.** The proton (a) and neutron (b) transition densities for the transition to the  $1^-$  state in  $^{90}\text{Zr}$  and  $^{116}\text{Sn}$  nuclei using SLy5 and SLy4 Skyrme parameterizations



**Figure 10.** The proton (a) and neutron (b) transition densities for the transition to the  $3^-$  state in  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Zr}$  and  $^{116}\text{Sn}$  nuclei using SLy5 and SLy4 Skyrme parameterizations



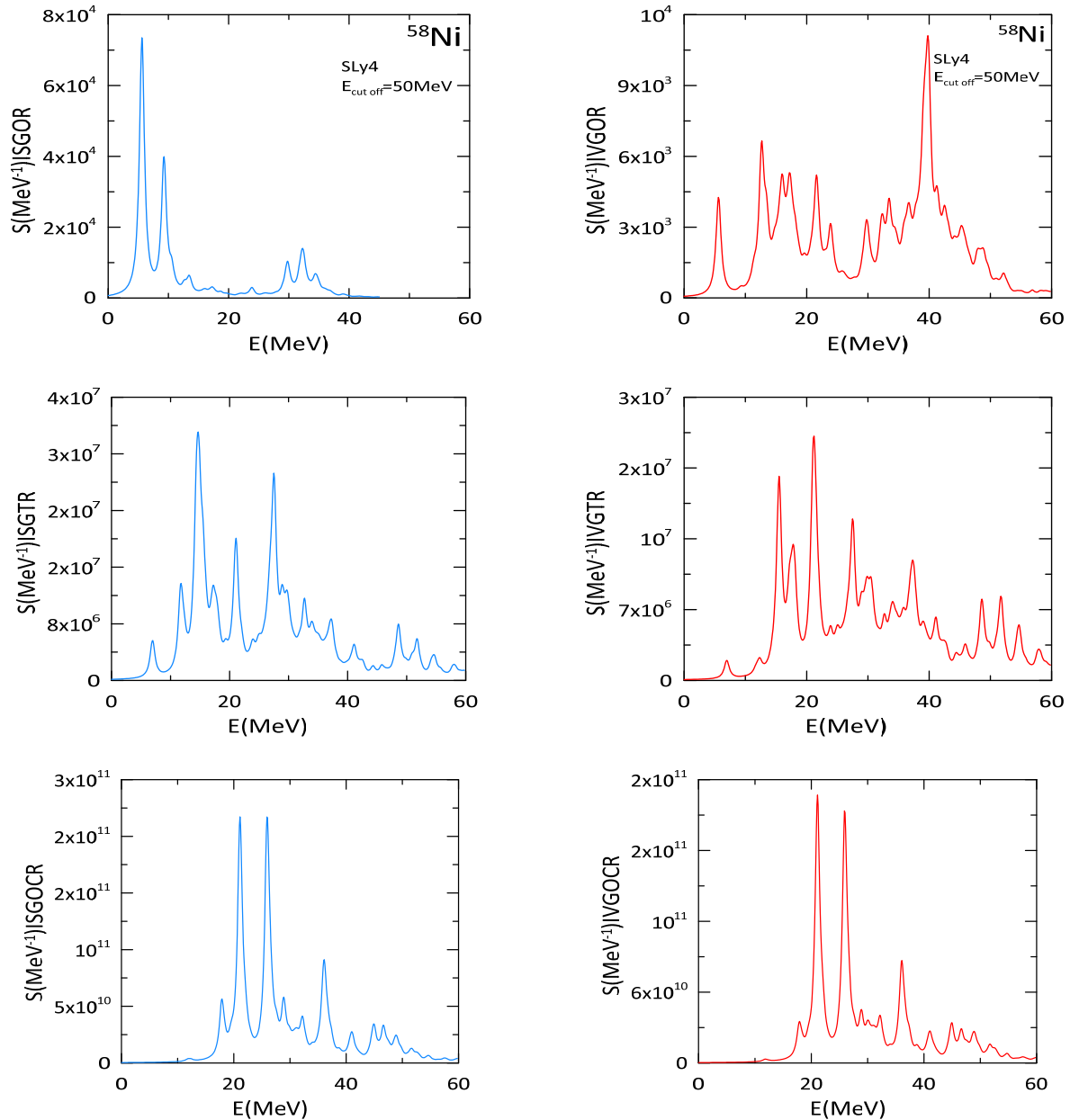
**Figure 11.** The proton (a) and neutron (b) transition densities for the transition to the  $5^-$  state in  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Zr}$ ,  $^{116}\text{Sn}$  and  $^{144}\text{Sm}$  nuclei using SLy5 and SLy4 Skyrme parameterizations.



**Figure 12:** The proton (a) and neutron (b) transition densities for the transition to the  $7^-$  state in  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Zr}$ ,  $^{116}\text{Sn}$  and  $^{144}\text{Sm}$  nuclei using SLy5 and SLy4 Skyrme parameterizations

**Giant Resonance Modes.** The most visible manifestation of nucleon collective motion is GRs. Figs. 13-16 show the strength functions for the excitation to the negative parity states in  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Zr}$ ,  $^{116}\text{Sn}$ , and  $^{144}\text{Sm}$  nuclei. The ISGDR is significantly fragmented compared to ISGTR, ISGOR, and ISGOGR, which appear to be less fragmented. This was reflected in IVGTR, IVGOR, IVGDR, and IVGOGR. This indicates that the collective strength of high multipolarity GRs is distributed, and the quantity of collective strength falls as the multipolarity  $\nabla J$  of the GRs [32]. It is important to note that the IS mode is produced when the neutrons and protons vibrate in phase, while the IV mode is produced when they vibrate in the opposite phase. The higher modes of strength functions for higher modes emerge clearly using RPA approach calculations, which explored upper-level excitation and yielded the collective nuclear motion of nucleons, energy, spin, and parity, all properties of exciting levels. This emphasized the significance of calculating GR strength functions using completely self-consistent HF-based RPA. Collective motion was believed to be a common characteristic of quantum many-body systems. It is believed that the distribution of transition strengths of a low external field that excites the nucleus exhibits resonance peaks that correspond to the elementary vibrational collective modes.

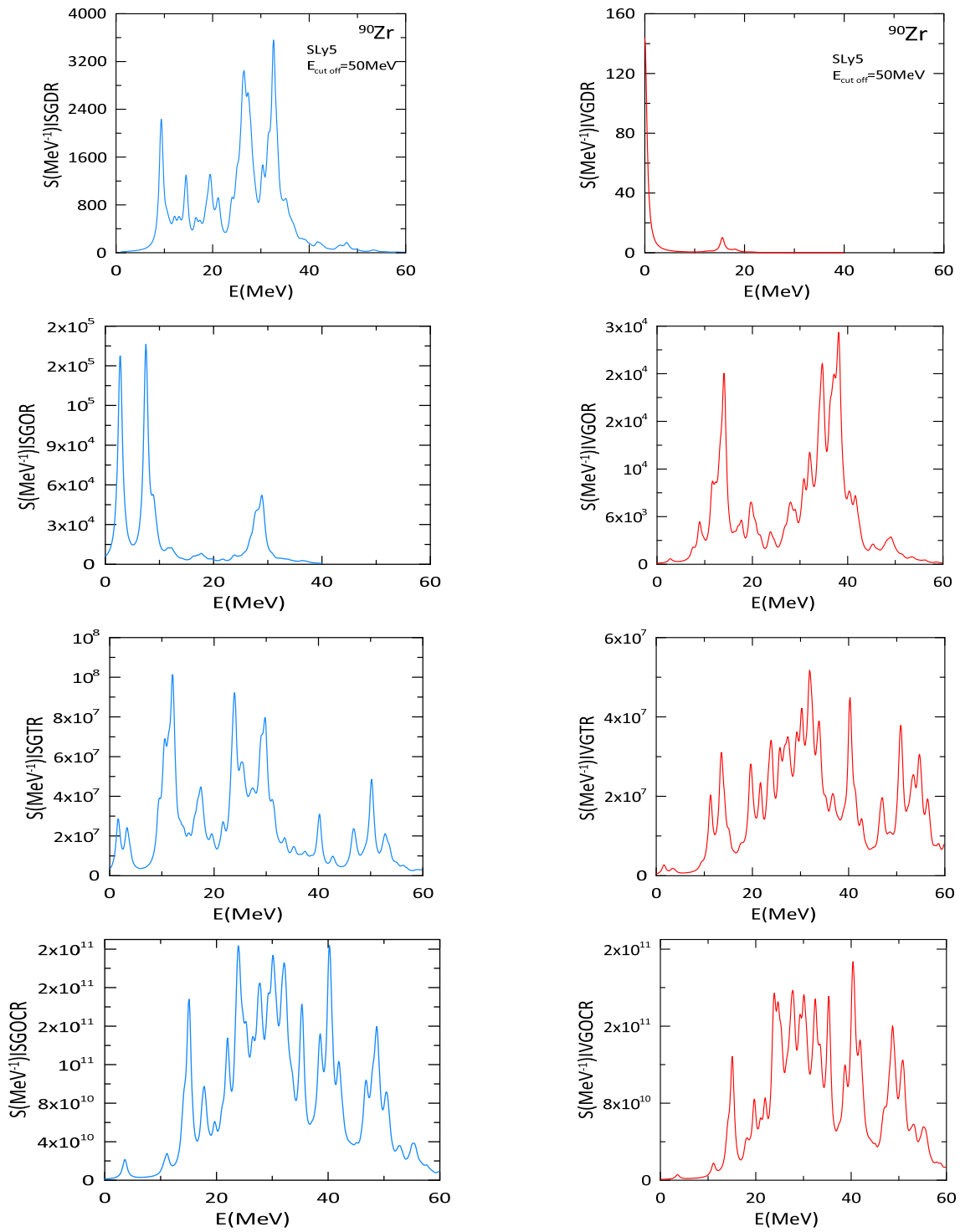
Tables (6-9) summarize the overall calculated results of the EWSR  $m1$  and RPA  $m1$  using SLy5 parameterizations. The total EWSR of strengths is growing compared to those computed using RPA. Therefore,  $m1$  includes those from  $p-h$  strengths. The D.C (represents the double commutator which gives EWSR). The deviations of  $m1$  (RPA) from  $m1$  (EWSR) from R values are minor for all collective modes, indicating high precision for self-consistent HF-RPA calculations. It is also worth mentioning that it is the most widely used. The GDR is a well-studied GR wherein protons vibrate collectively against neutrons. This, in the end, shows how strongly neutrons and protons interact inside the nucleus, which is a key part of nuclear interaction.



**Figure 13.** IS (left panel) as well as IV (right panel) HF-based RPA strength function for the octopole (E3), triacontadipole (E5), and octacosahexapole (E7) in  $^{58}\text{Ni}$ , using the SLy4 Skyrme interaction

**Table 6.** The realisation of the EWSR ( $m1$ ) for the IS and IV within the RPA using multipoles J for  $^{58}\text{Ni}$ . Using the SLy5 parametrization with the summing from 0 to  $E_{\text{max}}=60$  MeV.  $\text{MeVfm}^{2J}$  are the units.  $R = m1(\text{RPA}) / m1(\text{D.C.})$

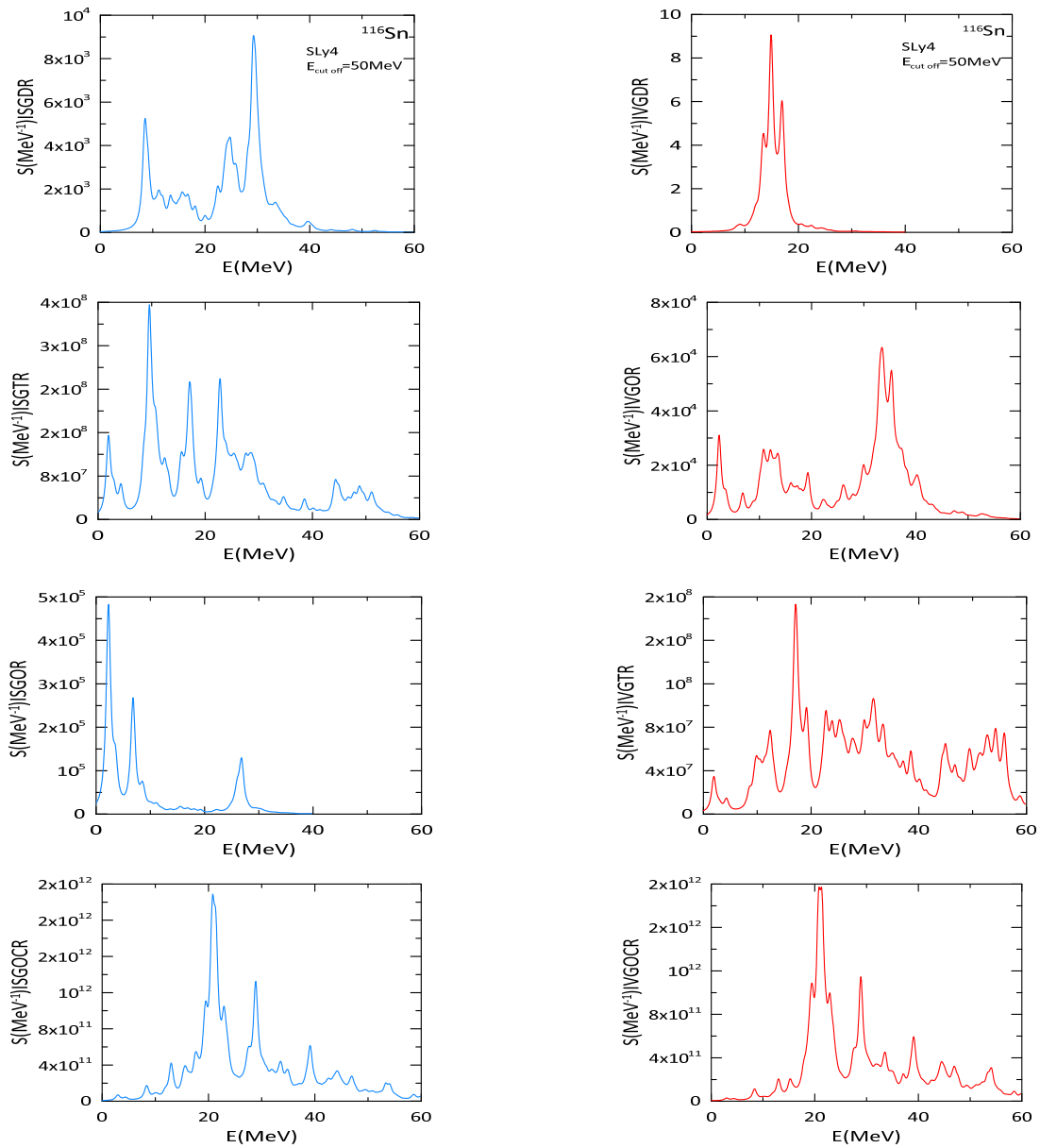
$J^\pi$	T	$m1(\text{RPA})$	$m1(\text{D.C.})$	R
$3^-$	0	$3.84191 \times 10^6$	$3.64699 \times 10^6$	1.05344
	1	$4.17831 \times 10^6$	$3.98378 \times 10^6$	1.04883
$5^-$	0	$1.06005 \times 10^{11}$	$1.01450 \times 10^{11}$	1.04489
	1	$1.08982 \times 10^{11}$	$1.05378 \times 10^{11}$	1.03420
$7^-$	0	$4.71703 \times 10^{13}$	$4.30197 \times 10^{13}$	1.09648
	1	$4.74086 \times 10^{13}$	$1.37570 \times 10^{17}$	$3.44614 \times 10^{-4}$



**Figure 14.** IS (left panel) as well as IV (right panel) HF-based RPA strength function for the dipole photo absorption cross section (E1), octopole (E3), triacontadipole (E5), and octacosahexapole (E7)

**Table 7.** The same as Table 6, for  $^{90}\text{Zr}$ . The results are obtained by using the SLy4 parameterization.

$J^\pi$	T	m1 (RPA)	m1(D.C)	R
1 <sup>-</sup>	0	$9.02386 \times 10^5$	$9.14815 \times 10^5$	0.98641
	1	$3.84977 \times 10^2$	$3.88898 \times 10^2$	0.98991
3 <sup>-</sup>	0	$9.41224 \times 10^6$	$9.51103 \times 10^6$	0.98961
	1	$1.03355 \times 10^7$	$1.04769 \times 10^7$	0.98650
5 <sup>-</sup>	0	$3.77037 \times 10^{10}$	$3.90294 \times 10^{10}$	0.96603
	1	$3.92052 \times 10^{10}$	$4.09882 \times 10^{10}$	0.95649
7 <sup>-</sup>	0	$1.65031 \times 10^{14}$	$1.97037 \times 10^{14}$	0.837565
	1	$1.66744 \times 10^{14}$	$1.27032 \times 10^{18}$	$1.31261 \times 10^{-4}$



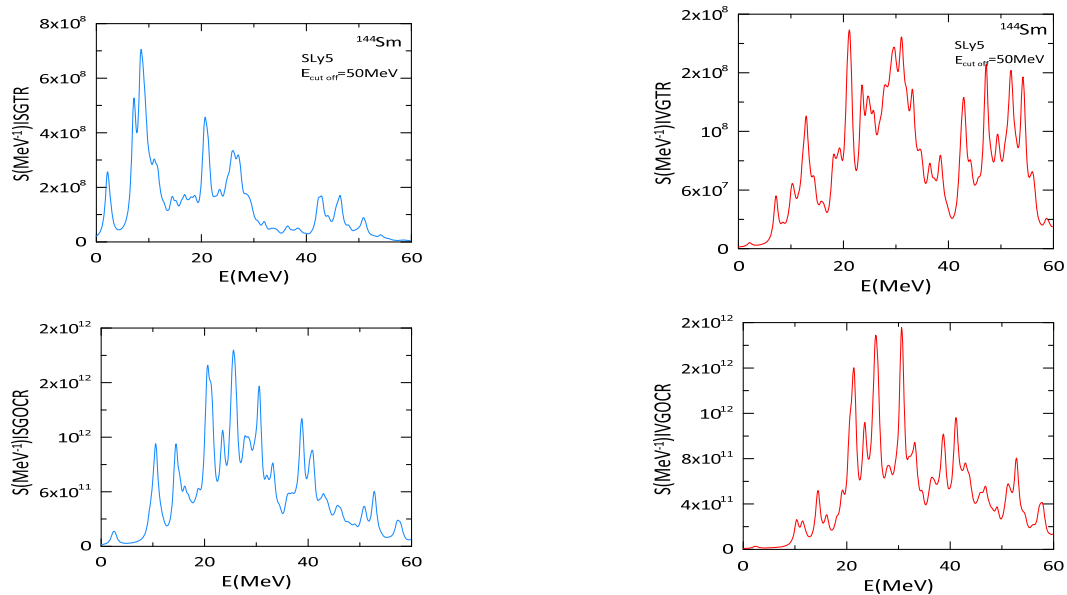
**Figure 15.** IS (left panel) as well as IV (right panel) HF-based RPA strength function for the dipole photo absorption cross section (E1), octopole (E3), triacontadipole (E5), and octacosahexapole (E7) in  $^{116}\text{Sn}$ , using the SLy4 Skyrme interaction

**Table 8.** The same as Table 7, for  $^{116}\text{Sn}$ . The results are obtained by using the SLy4 parameterization.

$J^\pi$	T	m1 (RPA)	m1(D.C)	R
1 <sup>-</sup>	0	$1.58971 \times 10^6$	$1.60455 \times 10^6$	0.9907
	1	$4.95137 \times 10^2$	$4.98954 \times 10^2$	0.9923
3 <sup>-</sup>	0	$1.67417 \times 10^7$	$1.68763 \times 10^7$	0.9920
	1	$1.84779 \times 10^7$	$1.86690 \times 10^7$	0.9897
5 <sup>-</sup>	0	$9.05465 \times 10^{10}$	$9.30575 \times 10^{10}$	0.9730
	1	$9.46386 \times 10^{10}$	$9.80651 \times 10^{10}$	0.9650
7 <sup>-</sup>	0	$5.76248 \times 10^{14}$	$6.39154 \times 10^{14}$	0.9015
	1	$5.83076 \times 10^{14}$	$6.21586 \times 10^{18}$	$9.3804 \times 10^{-5}$

**Table 9.** The same as Table 8, for  $^{144}\text{Sm}$ . The results are obtained by using the SLy5 parameterization.

$J^\pi$	T	m1 (RPA)	m1(D.C)	R
5 <sup>-</sup>	0	$1.7375 \times 10^{11}$	$1.74605 \times 10^{11}$	0.9951
	1	$1.83920 \times 10^{11}$	$1.85616 \times 10^{11}$	0.9908
7 <sup>-</sup>	0	$1.11146 \times 10^{15}$	$1.24269 \times 10^{15}$	0.8943
	1	$1.13293 \times 10^{15}$	$1.70570 \times 10^{19}$	$6.6420 \times 10^{-5}$



**Figure 16.** IS (left panel) as well as IV (right panel) HF-based RPA strength function for the triacontadipole (E5), and octacosahexapole (E7) in  $^{144}\text{Sm}$ , using the SLy5 Skyrme interaction

## CONCLUSIONS

The present research has led us to conclude that self-consistent RPA calculations are based on Skyrme effective nucleon-nucleon interaction, and these calculations give a significant description of the ground state properties for the closed-shell for  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{90}\text{Zr}$ ,  $^{116}\text{Sn}$ , and  $^{144}\text{Sm}$ . Considering the binding energy, neutron, proton, and neutron skin thickness, and charge radii, remarkable correlations were found with experimental data. For the static nuclear properties, the SLy4 and SLy5 parameterizations give the best results in compression with experimental data. Regarding dynamic properties, the RPA method is an efficient tool for describing the higher modes resulting from the collective motion of nucleons within the nucleus. It can also be used to describe the transition density for proton and neutron modes, in addition to GRs modes. The RPA method is the simplest theory that predicts the main features of giant resonance (GR) with a high degree of accuracy.

**Competing interests.** The authors did not receive support from any organization for the submitted work.

## ORCID IDs

Noor M. Kareem, <https://orcid.org/0000-0002-2275-9398>; Ali A. Alzubadi, <https://orcid.org/0000-0002-7226-1141>

## REFERENCES

- [1] A.L. Fetter, and J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, (Dover Publications, Mineola, NY, 2003).
- [2] J.W. Negele, "The mean-field theory of nuclear structure and dynamics," *Rev. Mod. Phys.* **54**(4), 913 (1982). <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.54.913>
- [3] M. Bender, P.-H. Heenen, and P.-G. Reinhard, "Self-consistent mean-field models for nuclear structure," *Rev. Mod. Phys.* **75**(1), 121 (2003). <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.75.121>
- [4] J.R. Stone, and P.G. Reinhard, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **58**(2), 587 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.pnpnp.2006.07.001>
- [5] K.S. Krane, *Introductory Nuclear Physics*, 3rd ed. (John Wiley Sons, New York, 1987).
- [6] A.A. Alzubadi, A.J. Alhaideri, and N.F. Lattoofi, "Study of static and dynamic properties of even-even 14–24O and 38–54Ca in the frame of Random Phase Approximation (RPA) method with different Skyrme parameterizations," *Phys. Scr.* **96**(5), 55304 (2021). <https://doi.org/10.1088/1402-4896/abe9f0>
- [7] S.S.M. Wong, *Introductory nuclear physics*, (John Wiley & Sons, 2008).
- [8] W. Greiner, and J.A. Maruhn, *Nuclear models*, (Springer, 1996).
- [9] D.R. Hartree, "The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods," in: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24(1), 1928, pp. 89-110, (Cambridge University Press, 2008). <https://doi.org/10.1017/S0305004100011919>
- [10] G. Co', and S. De Leo, "Hartree–Fock and random phase approximation theories in a many-fermion solvable model," *Mod. Phys. Lett. A*, **30**(36), 1550196 (2015). <https://doi.org/10.1142/S0217732315501965>
- [11] E.B. Suckling, Ph.D. dissertation, The University of Surrey, March 2011.
- [12] D. Vautherin, and D.M. Brink, "Hartree-Fock calculations with Skyrme's interaction," *Phys. Lett. B*, **32**(3), 149 (1970). [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(70\)90458-2](https://doi.org/10.1016/0370-2693(70)90458-2)
- [13] B.A. Brown, S.E. Massen, and P.E. Hodgson, "Proton and neutron density distributions for A= 16-58 nuclei," *J. Phys. G. Nucl. Phys.* **5**(12), 1655 (1979). <https://doi.org/10.1088/0305-4616/5/12/008>
- [14] T.H.R. Skyrme, "The effective nuclear potential," *Nucl. Phys.* **9**(4), 615 (1958). [https://doi.org/10.1016/0029-5582\(58\)90345-6](https://doi.org/10.1016/0029-5582(58)90345-6)

- [15] E. Chabanat, P. Bonche, P. Haensel, J. Meyer, and R. Schaeffer, "A Skyrme parametrization from subnuclear to neutron star densities Part II. Nuclei far from stabilities," Nucl. Phys. A, **635**(1-2), 231 (1998). [https://doi.org/10.1016/S0375-9474\(98\)00180-8](https://doi.org/10.1016/S0375-9474(98)00180-8)
- [16] K.L.G. Heyde, "The nuclear shell model," in: *The Nuclear Shell Model*, (Springer, Berlin, Heidelberg, 1994), pp. 58-154. [https://doi.org/10.1007/978-3-642-79052-2\\_4](https://doi.org/10.1007/978-3-642-79052-2_4)
- [17] D. Vautherin, and D.M.T. Brink, "Hartree-Fock calculations with Skyrme's interaction. I. Spherical nuclei," Phys. Rev. C, **5**(3), 626 (1972). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.5.626>
- [18] D.J. Rowe, *Nuclear Collective Motion*, (Methuen and Co, Ltd., London, 1970), vol. 211.
- [19] P. Sarriguren, E.M. de Guerra, and R. Nojarov, "Spin M1 excitations in deformed nuclei from self-consistent Hartree-Fock plus random-phase approximation," Phys. Rev. C, **54**(2), 690 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.54.690>
- [20] H. Nakada, "Mean-field and RPA approaches to stable and unstable nuclei with semi-realistic NN interactions," in Journal of Physics: Conference Series, **445**(1), 012011 (2013). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/445/1/012011>
- [21] P.J. Brussaard, and P.W.M. Glaudemans, *Shell-model applications in nuclear spectroscopy*, (North-Holland publishing company, 1977).
- [22] P. Ring, and P. Schuck, *Problems of many bodies*, (Springer-Verlag, New York, 1980).
- [23] D.R. de Oliveira, "The Hartree-Fock and the random phase approximations applied to Ne<sup>20</sup>, Si<sup>28</sup> and Ar<sup>36</sup>: Energy Levels and E2 Transition" Rev. Bras. Física, **1**(3), 403 (1971).
- [24] B.A. Brown, *Lecture notes in nuclear structure physics*, Natl. Super. Conduct. Cyclotr. Lab. (2005). <https://people.nsl.msu.edu/~brown/reaction-codes/wspot/wspot-brown.pdf>
- [25] I. Angeli, and K.P. Marinova, "Table of experimental nuclear ground state charge radii: An update," At. Data Nucl. Data Tables, **99**(1), 69 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.adt.2011.12.006>
- [26] Lomonosov Moscow State University, Skobel'syn Institute Of Nuclear Physics, Center Dannykh Fotoyadernykh Experimentov, <http://cdfc.sinp.msu.ru/services/>
- [27] H. De Vries, C.W. De Jager, and C. De Vries, "Nuclear charge-density-distribution parameters from elastic electron scattering," At. Data Nucl. Data Tables, **36**(3), 495 (1987). [https://doi.org/10.1016/0092-640X\(87\)90013-1](https://doi.org/10.1016/0092-640X(87)90013-1)
- [28] Myanmar Education Research and Learning Portal, H.M. Thandar, and K.S. Myint, "Calculation of Form Factor for <sup>116</sup>Sn and <sup>118</sup>Sn by Using Three-Parameter Gaussian Model Density Distribution." <https://meral.edu.mm/records/5559>
- [29] S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, and S. Péru, "First Gogny-Hartree-Fock-Bogoliubov nuclear mass model," Phys. Rev. Lett. **102**(24), 242501 (2009). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.242501>
- [30] B.K. Agrawal, S. Shlomo, and A.I. Sanzhur, "Self-consistent Hartree-Fock based random phase approximation and the spurious state mixing," Phys. Rev. C, **67**(3), 034314 (2003). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.67.034314>
- [31] P.-G. Reinhard, D.J. Dean, W. Nazarewicz, J. Dobaczewski, J.A. Maruhn, and M. R. Strayer, "Shape coexistence and the effective nucleon-nucleon interaction," Phys. Rev. C, **60**(1), 14316 (1999). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.60.014316>
- [32] P. Chomaz and N. Frascaria, "Multiple phonon excitation in nuclei," P00020240, 1993. <https://cds.cern.ch/record/257796/files/P00020240.pdf>
- [33] International Atomic Energy Agency - Nuclear Data Section. Vienna International Centre, Vienna, Austria. <https://www-nds.iaea.org/>

## ДОСЛІДЖЕННЯ ЯДЕРНОЇ СТРУКТУРИ ДЕЯКИХ ЯДЕР ЗА ДОПОМОГОЮ САМОУЗГОДЖЕНИХ РОЗРАХУНКІВ RPA ІЗ ВЗАЄМОДІЄЮ ТИПУ SKYRME

Нур М. Карім<sup>a</sup>, Алі А. Алзубаді<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Університет Багдада, Науковий коледж, факультет фізики

У цьому дослідженні були вивчені деякі статичні та динамічні ядерні властивості ядер із закритою оболонкою: <sup>58</sup>Ni, <sup>90</sup>Zr, <sup>116</sup>Sn і <sup>144</sup>Sm з використанням методу Random Phase Approximation (RPA) і різних параметрів Скірма, зокрема SyO-, Sk255, SyO+, SLy4, BSk17 і SLy5. Зокрема, у дослідженнях статичних властивостей, таких як ядерна густина для нейтронів, протонів, маса та густина заряду з їхніми відповідними середньоквадратичними радіусами, одночастинкові розподіли ядерної густини. Усі отримані результати добре узгоджуються з відповідними експериментальними даними. Що стосується динамічних властивостей, також були вивчені енергія збудження, щільність переходу та гігантські резонансні моди для збудження низькорозташованих негативних збуджених станів 1<sup>-</sup>, 3<sup>-</sup>, 5<sup>-</sup> та 7<sup>-</sup>. Результати показують, що оцінки RPA з взаємодіями типу Skyrme є хорошим способом опису властивостей структури парно-парних ядер із закритою оболонкою.

**Ключові слова:** сили SKYRME, Хартрі-Фок (HF), апроксимація випадкової фази (RPA), збуджений стан вищих мод, щільність енергії Skyrme

## EXOTIC STRUCTURE OF $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$ AND $^{23}\text{Al}$ - $^{23}\text{Ne}$ MIRROR NUCLEI<sup>†</sup>

 Ruqaya A. Mohammed<sup>a,\*</sup>,  Wasan Z. Majeed<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Department of Physics, College of Science, Baghdad University, Iraq

\*Corresponding Author E-mail: [ruqayaahmed9@gmail.com](mailto:ruqayaahmed9@gmail.com)

Received September 10, 2022; revised September 11, 2022; accepted September 15, 2022

In terms of the core nucleus plus valence nucleon, shell-model calculations using two model spaces and interactions, the relationship between a nucleus' proton skin, and the difference in proton radii of mirror pairs of nuclei with the same mass number are investigated. In this work, two pairs of mirror nuclei will be studied:  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$  and  $^{23}\text{Al}$ - $^{23}\text{Ne}$ . For  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$  nuclei, p-shell and mixing of psd orbits are adopted with Cohen-Kurath (ckii) and psdsu3 interactions. While for  $^{23}\text{Al}$ - $^{23}\text{Ne}$ , the sd-shell and sdpf shell are adopted with the universal shell model (USD) and sdpfwa interactions. Also, the ground state density distributions, elastic form factors, and root mean square radii of these pairs' nuclei are studied and compared with available experimental data. In general, it was found that the rms radius of the valence proton(s) is larger than that of the valence neutron(s) in its mirror nucleus. The results show that these nuclei have the exotic structure of a halo or skin.

**Keywords:** Mirror Nuclei, Proton and Neutron Skin Thickness, Density Distribution, Exotic Nucleus

**PACS:** 14.20.Dh, 21.10.Ft, 21.10.Gv, 21.10.Hw, 21.60.-n, 21.60.Cs

### 1. Introduction

The infinite lifetimes of stable nuclei and their relatively balanced Z to N ratios—which range from around 1 to roughly 1.5 – define them. There are around 300 of these nuclear types. Exotic or unstable nuclei are other nuclei whose total number is unknown. Through beta processes, the exotic nuclei decay to other nuclei where Z and N are more evenly balanced. Until a stable nucleus is created, this decay normally occurs successively. As a result, only stable nuclei exist on Earth, as opposed to exotic nuclei, which are figuratively exotic [1]. In nuclear physics, it is important to investigate the mirror nuclei that have an interchanged number of protons and neutrons because it directly addresses the isospin symmetry idea, which was described by Heisenberg in 1932 [2]. In the isospin explanation of the nuclear forces, the binding energies of the mirror nuclei should be similar, apart from Coulomb interaction. While if Coulomb's interaction is taken into account, the energy difference between two mirror nuclei has come from the electromagnetic interaction [3].

In order to characterize the charge radii, theoretical mean-field techniques such as the Hartree-Fock-Bogolyubov (HFB) method, the nuclear shell model, and different shell model approximations have been developed. Therefore, several updates to experimental charge radii databases in which around 1000 experimental data points have been analyzed and assembled [4, 5].

Nuclear structure studies have proven to benefit greatly from using electron-nucleus scattering. It has given us a great deal of knowledge, particularly regarding the charge density distributions of stable nuclei. Because of this, it is predicted that the new facilities at GSI [6, 7] and RIKEN [8–10] will offer a good opportunity to study the charge density, and consequently the proton density distribution, of exotic nuclei using elastic electron scattering. A physically effective indicator of the isovector characteristics of nuclear interactions is the neutron-skin thickness, which is a ground state parameter of the nucleus [11].

In addition, a rather interesting feature of studying the mirror nuclei is that the neutron skin thickness can be found through the knowledge of proton radii alone from the mirror pairs. It has recently been proposed that the difference between the charge radii of mirror nuclei is proportional to the neutron skin [12]. Various theoretical and experimental studies are conducted to investigate the properties of mirror nuclei [13, 14]. B.N. Giv and S. Mohammadi [15] (2017) calculated Coulomb displacement energies in mirror nuclei  $^{49}\text{Mn}$  and  $^{49}\text{Cr}$  and compared them with experimental data by using the shell model code. OXBASH A. Boso et al. [16] (2017) investigated mirror nuclei  $^{23}\text{Mg}$ - $^{23}\text{Na}$  by using the Mirror Energy Differences (MED) in up to high spin it is a direct result of the breaking of isospin symmetry. K. Arai et al. [17] (2018), investigated the structure of the mirror nuclei  $^9\text{Be}$  and  $^9\text{B}$  by using a completely antisymmetrized 9-nucleon wave function in a microscopic  $\alpha+\alpha+n$  and  $\alpha+\alpha+p$  three-cluster model.

There are two aims of this study. First, calculate the skin thickness through the knowledge of proton radii alone from the mirror pairs. Second, investigate the exotic structure of two pairs of mirror nuclei,  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$  and  $^{23}\text{Al}$ - $^{23}\text{Ne}$ , by studying the ground state properties like rms radii, density distribution, and form factors.

### 2. THEORY

The electron scattering form factors for the scattering of an electron from a target nucleus are given by [18]:

$$F_{J,t_z}(q) = \sqrt{\frac{4\pi}{2J_i+1}} \frac{1}{N_{t_z}} \left\langle J_f \left\| \sum_{i=1}^{N_{t_z}} \hat{T}_{J,t_z}(q,i) \right\| J_i \right\rangle F_{fs}(q) F_{cm}(q) \quad (1)$$

<sup>†</sup> Cite as: R.A. Mohammed, and W.Z. Majeed, East Eur. J. Phys. East Eur. J. Phys. 4, 72 (2022), <https://doi.org/10.26565/2312-4334-2022-4-05>  
© R.A. Mohammed, W.Z. Majeed, 2022



$J_i$  and  $J_f$  represent the nucleus' initial and final states, respectively, while  $N_{t_z}$  denoting the normalization factor.  $F_{fs}(q)$  is the finite nucleon size correction and  $F_{cm}(q)$  is the center of mass correction. The form of these corrections is [19,20]:

$$F_{fs}(q) = \left[ 1 + (q / 4.33 \text{ fm}^{-1})^2 \right]^{-2} \quad (2)$$

$$F_{cm}(q) = e^{q^2 b^2 / 4A}$$

where  $q$  is the momentum transfer,  $A$  is the nuclear mass number and  $b$  is the harmonic-oscillator size parameter

The longitudinal multipole operator  $\hat{T}_{J,t_z}$  is given by [18]:

$$\hat{T}_{J,t_z}(q, i) = \int d^3r j_J(qr) Y_{JM}(\Omega) \hat{\rho}_{t_z}(\vec{r}, i) \quad (3)$$

where the spherical Bessel's function is represented by  $j_J(qr)$  and  $\hat{\rho}_{t_z}(\vec{r}, i)$  is the operator for the density of protons and neutrons, and is given by

$$\hat{\rho}_{t_z}(\vec{r}, i) = \sum_{i=1}^A \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (4)$$

Then, equation (4) is reduced to:

$$\hat{T}_{J,t_z}(q, i) = \sum_{i=1}^A j_J(qr_i) Y_{JM}(\Omega_i) \quad (5)$$

The reduced matrix element in equation (1) can be written as a sum over elements of the one body density matrix (OBDM) elements and the corresponding reduced single particle matrix element [21]

$$\left\langle J_f \left\| \sum_{i=1}^{N_{t_z}} \hat{T}_{J,t_z} \right\| J_i \right\rangle = \sum_{ab} OBDM(J_f, J_i, a, b, J, t_z) \left\langle a \left\| \hat{T}_{J,t_z} \right\| b \right\rangle \quad (6)$$

where  $a$  and  $b$  label the single-particle states. The OBDM is defined as [21]

$$OBDM(J_f, J_i, a, b, J, t_z) = \frac{\left\langle J_f \left\| \left[ a_{a,t_z}^+ \otimes \tilde{a}_{b,t_z} \right]^{(J)} \right\| J_i \right\rangle}{\sqrt{2J+1}} \quad (7)$$

The reduced single-particle matrix elements of the Coulomb operator in equation (6) are given by

$$\left\langle a \left\| \hat{T}_J \right\| b \right\rangle = \int_0^\infty dr r^2 j_J(qr) \langle j_a \| Y_J \| j_b \rangle R_{n_a l_a}(r) R_{n_b l_b}(r) \quad (8)$$

Where  $R_{nl}(r)$ , is the radial single-particle wave functions. The Coulomb form factors given in equation (1) become:

$$F_{J,t_z}(q) = \frac{1}{N_{t_z}} \sqrt{\frac{4\pi}{2J_i+1}} \sum_{a,b} OBDM(J_i, J_f, a, b, J, t_z) \langle j_a \| Y_J \| j_b \rangle \int_0^\infty dr r^2 R_{n_a l_a}(r) R_{n_b l_b}(r) j_J(qr) F_{fs}(q) F_{cm}(q), \quad (9)$$

and can be written as

$$F_{J,t_z}(q) = \frac{4\pi}{N_{t_z}} \int_0^\infty dr r^2 \rho_g(r) j_J(qr) F_{fs}(q) F_{cm}(q), \quad (10)$$

where  $\langle j_a \| Y_J \| j_b \rangle$  represents the reduced matrix element of the spherical Harmonics and  $\rho_g(r)$  is nucleon density distribution and is given by [21]:

$$\rho_g(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{1}{2J_i+1}} \sum_{a,b} OBDM(J_i, J_f, a, b, J, t_z) \langle j_a \| Y_J \| j_b \rangle R_{n_a l_a}(r) R_{n_b l_b}(r). \quad (11)$$

For the ground state  $J = 0$  density distribution, one has  $J_i = J_f$  and  $n_a = n_b$ ,  $\ell_a = \ell_b$ ,  $j_a = j_b$ . The ground state density distribution takes the form:

$$\rho_g(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{1}{2J_i} + 1} \sum_a \text{OBDM}(J_i, a, J = 0, t_z) \sqrt{2J_a + 1} |R_{n_a l_a}(r)|^2. \quad (12)$$

Finally, the corresponding elastic scattering  $J = 0$  form factor (C0) is written in the following form

$$F_{0,g}(q) = \frac{4\pi}{g} \int_0^\infty dr r^2 \rho_g(r) j_0(qr) F_{fs}(q) F_{cm}(q). \quad (13)$$

The matter density distribution is given by [22]:

$$\rho_m(r) = \rho_{p+n}^{core}(r) + \rho_{p(n)}^{valence}(r). \quad (14)$$

Therefore, the corresponding terms radii are given by

$$\langle r^2 \rangle_N = \frac{4\pi}{N} \int_0^\infty dr r^4 \rho_N(r) \quad (15)$$

where N represents the corresponding number of nucleons in each case.

The neutron skin thickness  $\Delta \langle r^2 \rangle_n^{1/2}$  and the proton skin thickness  $\Delta \langle r^2 \rangle_p^{1/2}$  which are related to the difference between the neutron  $\langle r^2 \rangle_n^{1/2}$  and proton  $\langle r^2 \rangle_p^{1/2}$  rms radii for nuclei and their mirror as [11,16]:

$$\Delta \langle r^2 \rangle_n^{1/2} = \langle r^2 \rangle_n^{1/2} - \langle r^2 \rangle_p^{1/2}, \quad (16)$$

$$\Delta \langle r^2 \rangle_p^{1/2} = \langle r^2 \rangle_p^{1/2} - \langle r^2 \rangle_n^{1/2}. \quad (17)$$

Considering the effects of charge-dependent and Coulomb contributions are turned off, for mirror nuclei, the neutron radius of a nucleus (Z, N) is the same as the proton radius of its mirror nucleus (Z, N) [11], then:

$$\Delta \langle r^2 \rangle_{mirror}^{1/2} = \langle r^2 \rangle_p^{1/2}(N, Z) - \langle r^2 \rangle_p^{1/2}(Z, N). \quad (18)$$

Eq. (17) represents the important method to determine neutron and proton skins using charge radii of mirror pairs nuclei.

### 3. RESULTS AND DISCUSSION

Proton, neutron, core, valence and matter radii, density distributions, and electron scattering form factors of two pairs mirror nuclei  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$  and  $^{23}\text{Al}$ - $^{23}\text{Ne}$  are calculated in the framework of a shell model using core plus valence calculations with different model space and two harmonic-oscillator size parameters. One of these parameters is for core nucleons (b) to reproduce the core radius and the other for the outer nucleon(s) ( $b_v$ ) to reproduce the rms matter radius. The nuclear Shell model calculations were performed with shell model code OXBASH [23], where the one body density matrix (OBDM) elements of the core parts are obtained.

For  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$  ( $J^\pi T = 1/2^- 3/2$ ) nuclei, the theoretical calculation using the shell model takes two ways. Firstly, the Cohen–Kurath interaction CKII [24] is used. The configurations  $(1s_{1/2})^4 (1p)^{11}$  are used for the core nucleons  $^{15}\text{O}$  ( $J^\pi T = 1/2^- 1/2$ ) and  $^{15}\text{N}$  ( $J^\pi T = 1/2^- 1/2$ ). The values of the oscillator size parameter (b) equal to 1.61 fm for  $^{15}\text{O}$  and  $b = 1.6$  fm for  $^{15}\text{N}$  are chosen to reproduce the experimental rms radii. The outer two nucleons in this pair of mirror nuclei are assumed to be in a pure  $1d_{5/2}$ . To reproduce the matter radii of  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$  different values of the oscillator size parameter ( $b_v$ ) are chosen for the extra nucleons  $b_v = 2.45$  fm for  $^{17}\text{Ne}$  and  $b_v = 1.61$  fm for  $^{17}\text{N}$ . These values of  $b_v$  give the matter radii agree with the measured values as shown in Table 1.

Secondly, the mixing of the *psd* orbits is used with the *psdsu3* interaction [25]. All core nucleons in  $^{15}\text{O}$  and  $^{15}\text{N}$  are considered to be active in all orbits in *psd* shells. The harmonic-oscillator size parameter,  $b = 1.75$  fm is used for core nucleons  $^{15}\text{O}$  and 1.57 fm for  $^{15}\text{N}$ . While the outer nucleons which are assumed to be in  $1d_{5/2}$  orbit have the values  $b_v = 2.43$  fm for  $^{17}\text{Ne}$  and  $b_v = 1.59$  fm for  $^{17}\text{N}$ . These values give the proton, neutron, valence, core, and matter radii in agreement with the measured value [26] as shown in Table 1, where the experimental and calculated rms radii for these nuclei are displayed.

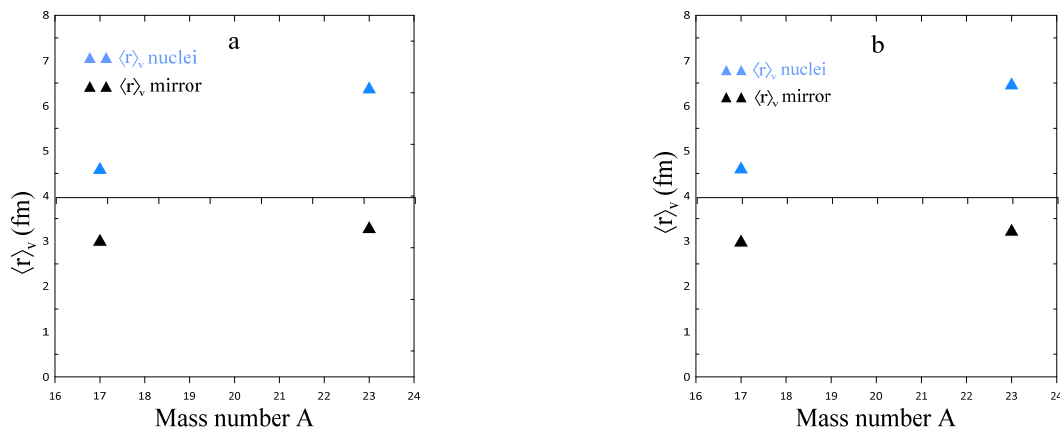
Regarding  $^{23}\text{Al}$ - $^{23}\text{Ne}$  ( $J^\pi T = 5/2^+ 3/2$ ) pair nuclei, the theoretical calculations are the same way as in  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$  nuclei but with different model space and interactions. Firstly, the configurations  $(1s_{1/2})^4 (1p)^{12}$  plus 7 nucleons moved in *sd* orbits are used for the core nucleons  $^{22}\text{Mg}$  ( $J^\pi T = 0^+ 1$ ) and  $^{22}\text{Ne}$  ( $J^\pi T = 0^+ 1$ ). In *sd* model space all orbits in 2s-1d shells are considered where the universal shell model USD [27] is used. To reproduce the core radii a value of  $b = 1.74$  fm is used for  $^{22}\text{Mg}$  and  $^{22}\text{Ne}$ . While the outer nucleon must be in  $1d_{5/2}$  with value  $b_v = 3.4$  fm for  $^{23}\text{Al}$  and  $b_v = 1.75$  fm for  $^{23}\text{Ne}$ .

Secondly, the *sdpfwa* [28] interaction is used for the core of  $^{23}\text{Al}$  -  $^{23}\text{Ne}$  nuclei with configuration  $(1s_{1/2})^4 (1p)^{12}$  plus 7 nucleons moved in *sdpf* orbits are used for the core nucleons  $^{22}\text{Mg}$  ( $J^\pi T = 0^+ 1$ ) and  $^{22}\text{Ne}$  ( $J^\pi T = 0^+ 1$ ). A value of  $b = 1.7$  fm is used for  $^{22}\text{Mg}$  and  $^{22}\text{Ne}$ , while the values  $b_v = 3.45$  fm and  $b_v = 1.72$  fm are used for the outer nucleon (which is assumed to be in a pure  $1d_{5/2}$ ) in  $^{23}\text{Al}$  and  $^{23}\text{Ne}$ , respectively. All values of  $b$  and  $b_v$  give the rms proton, neutron, valence, core, and matter radii in agreement with the measured value as shown in Table 1, where the experimental and calculated rms radii of two pairs of mirror nuclei are displayed. It is evident from this Table that for both interactions, the calculated rms radii and the experimental data coincide quite well.

**Table 1.** The values of rms proton  $\langle r^2 \rangle_p^{1/2}$ , neutron  $\langle r^2 \rangle_n^{1/2}$ , core  $\langle r^2 \rangle_c^{1/2}$ , valence  $\langle r^2 \rangle_v^{1/2}$  and matter  $\langle r^2 \rangle_m^{1/2}$  radii in fm for  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$  and  $^{23}\text{Al}$ - $^{23}\text{Ne}$  mirror nuclei

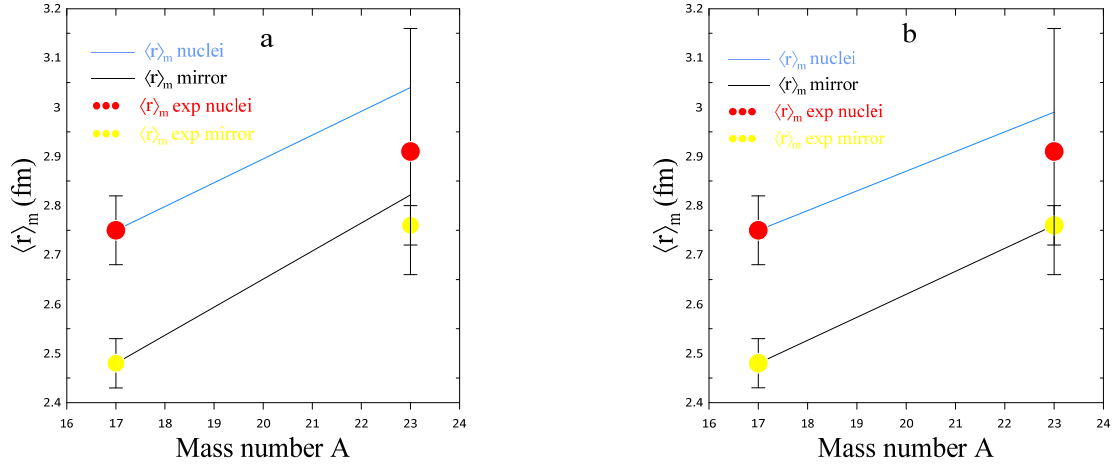
Nucleus		rms (fm)				
		$\langle r^2 \rangle_p^{1/2}$	$\langle r^2 \rangle_n^{1/2}$	$\langle r^2 \rangle_c^{1/2}$	$\langle r^2 \rangle_v^{1/2}$	$\langle r^2 \rangle_m^{1/2}$
$^{17}\text{Ne}$	Ckii	2.97	2.39	2.4	4.58	2.75
	psdsu3	2.98	2.38	2.41	4.54	2.75
	Exp.[26]	2.97(7)	2.69(7)	2.44(4)	-	2.75(7)
$^{17}\text{N}$	Ckii	2.39	2.54	2.4	2.99	2.48
	psdsu3	2.38	2.55	2.41	2.97	2.48
	Exp.[26]	-	-	2.42(1)	-	2.48(5)
$^{23}\text{Al}$	Usd	3.25	2.75	2.8	6.36	3.04
	Sdpfwa	3.21	2.68	2.73	6.45	2.99
	Exp.[26]	3.1(25)	2.634(23)	2.78(26)	-	2.91(25)
$^{23}\text{Ne}$	Usd	2.75	2.87	2.8	3.27	2.822
	Sdpfwa	2.68	2.81	2.73	3.21	2.76
	Exp.[26]	-	-	2.95(36)	-	2.76(4)

The values of valence nucleon radii  $\langle r^2 \rangle_v^{1/2}$  is very essential to studying the differences between the pairs of mirror nuclei. The calculations indicate that the different model space and interactions gives nearly linear dependence between  $\langle r^2 \rangle_v^{1/2}$  and the mass number. As shown in Fig. 1 with the increase in mass number, the values of the valence-proton(s) and valence-neutron(s) nuclei seem to be in two separate lines. For  $^{17}\text{Ne}$  and  $^{23}\text{Al}$  nuclei, the  $\langle r^2 \rangle_v^{1/2}$  values are larger than those for  $^{17}\text{N}$  and  $^{23}\text{Ne}$  nuclei, since the halo phenomenon in  $^{17}\text{Ne}$  and  $^{23}\text{Al}$  nuclei is connected to the outer proton(s) which give large rms radii.



**Figure 1.** The last nucleon(s) rms radius is calculated with (a) ckii (usd) interaction and (b) psdsu3 (sdpfwa) interaction as a function of mass number

Along with the increase in mass number  $A$ , there is also a linear increase in the difference between the valence proton and valence neutron values. With experimental data for both model spaces, one may plot  $\langle r^2 \rangle_m^{1/2}$  as a function of the mass number, as seen in Fig. 2, in order to compare the size of the exotic structure between mirror nuclei more clearly. This figure showed that both interactions give good agreement with experimental data. Also, it can be seen that the  $\langle r^2 \rangle_m^{1/2}$  values of  $^{17}\text{Ne}$  and  $^{23}\text{Al}$  nuclei are consistently larger than those of their respective mirror partners ( $^{17}\text{N}$  and  $^{23}\text{Ne}$ ) and almost in two different lines because the halo structure and the outer proton(s) halo in  $^{17}\text{Ne}$  and  $^{23}\text{Al}$  nuclei is weakly bound. In addition, with an increase in the mass number  $A$  of the nucleus, the exotic size difference between every pair of mirror nuclei increases.



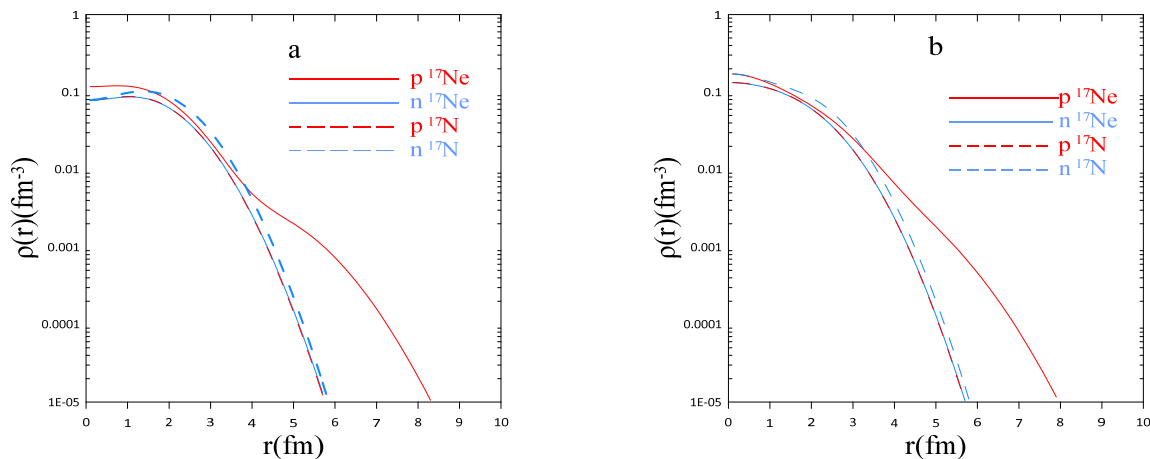
**Figure 2.** The calculated matter radii with (a) ckii (usd) interaction and (b) psdsu3 (sdpfwa) interaction as a function of mass number compared with the experimental data [29,30]

The results for the proton skins  $\Delta \langle r^2 \rangle_p^{1/2}$ , neutron skins  $\Delta \langle r^2 \rangle_n^{1/2}$  of the corresponding mirror nuclei and  $\Delta \langle r^2 \rangle_{mirror}^{1/2}$  in fm are given for the both model space and interactions in Table 2. It is noticed that the proton-skin thickness for a certain proton excess (Z-N) is greater than the neutron-skin thickness for the same degree of neutron excess (N-Z). The protons' Coulomb repulsion is clearly to blame for this. As noted in Table 2, there is little difference between the predicted proton skin values and the interactions and model space considered during these studies. In particular, the values of  $\Delta \langle r^2 \rangle_p^{1/2}$  obtained with psdsu3 (sdpfwa) interactions are larger than those with ckii (usd) interactions.

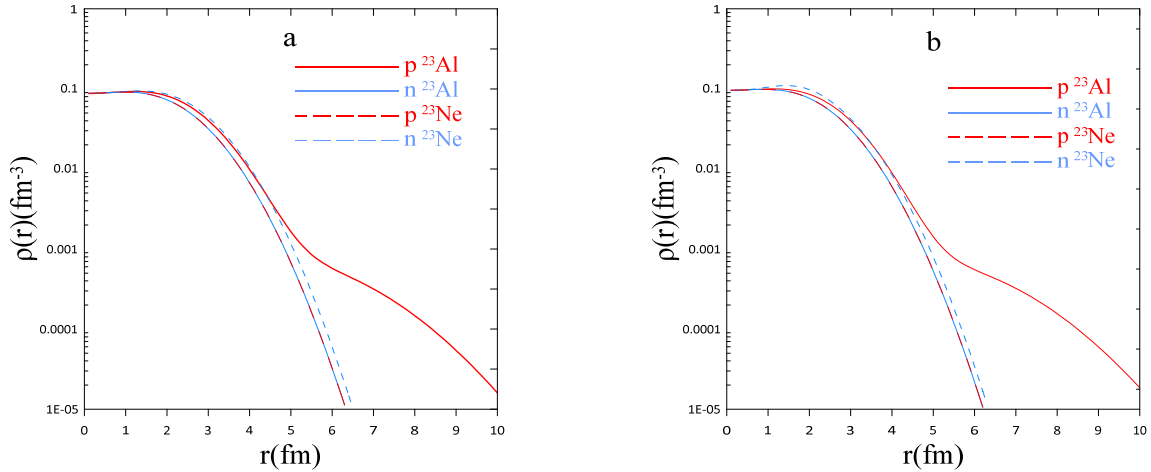
**Table 2.** Predicted proton skins  $\Delta \langle r^2 \rangle_p^{1/2}$ , neutron skins  $\Delta \langle r^2 \rangle_n^{1/2}$  of the corresponding mirror nuclei and  $\Delta \langle r^2 \rangle_{mirror}^{1/2}$  in fm

Nucleus	$\Delta \langle r^2 \rangle_p^{1/2}$		Mirror	$\Delta \langle r^2 \rangle_n^{1/2}$		$\Delta \langle r^2 \rangle_{mirror}^{1/2}$	
	Ckii	psdsu3		Ckii	psdsu3	Ckii	psdsu3
$^{17}\text{Ne}$	0.58	0.6	$^{17}\text{N}$	0.15	0.17	-0.58	-0.6
$^{23}\text{Al}$	USD	sdpfwa	$^{23}\text{Ne}$	USD	sdpfwa	USD	sdpfwa
	0.5	0.53		0.12	0.13	-0.5	-0.53

In order to investigate the differences between ground state properties of the mirror nuclei, the proton and neutron density distributions of two pairs of mirror nuclei are displayed in Figs. 3 and 4. Two model spaces and interactions are considered in these calculations, ckii (usd) interaction calculations are shown in part (a) in these figures and part (b) for psdsu3 (sdpfwa) interactions. The red solid and dashed curves in these figures are the calculated proton density and the blue solid and dashed curves represented the neutron density. These figures demonstrate how the calculated proton density of halo nuclei differs from the calculated neutron density of their mirror nuclei because the outer proton density is higher than that of the outer neutron in its mirror nucleus. These graphs make it clear that there are significant long tails in the density distribution of the ( $^{17}\text{Ne}$ ,  $^{23}\text{Al}$ ) nuclei, which correspond to the halo structure of these nuclei.

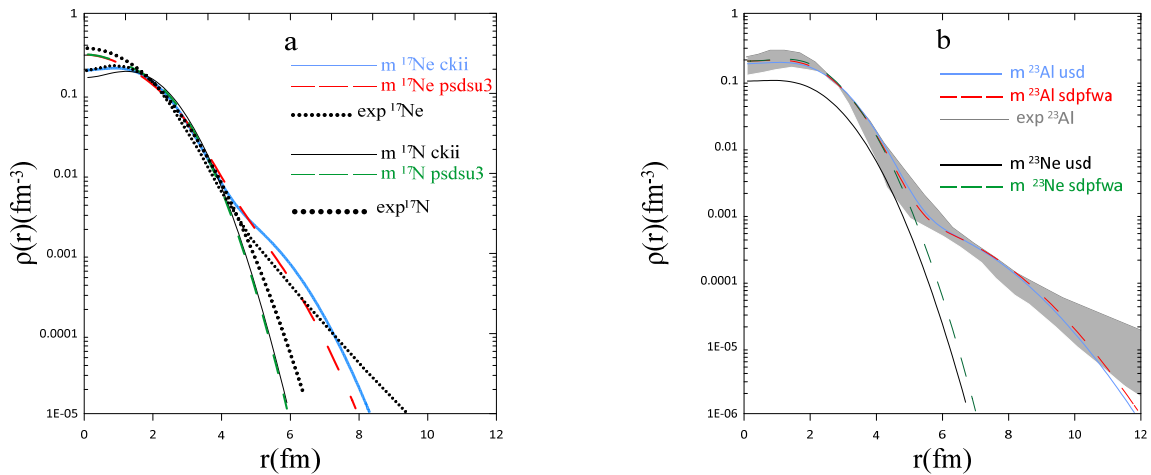


**Figure 3.** Proton and neutron density distributions of  $^{17}\text{Ne} - ^{17}\text{N}$  mirror nuclei (a) for ckii (b) for psdsu3.

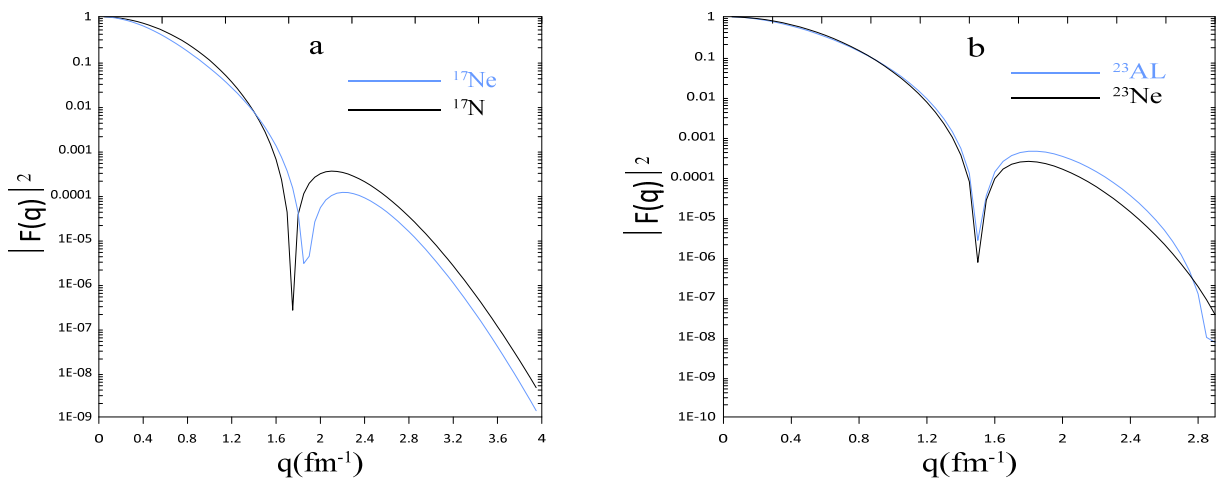


**Figure 4.** Proton and neutron density distributions of  $^{23}\text{Al}$  -  $^{23}\text{Ne}$  mirror nuclei (a) for usd , (b) for sdpfwa

The matter density distributions  $\rho_m(r)$  of  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$  and  $^{23}\text{Al}$ - $^{23}\text{Ne}$  nuclei are displayed in Figures (6a) and (6b) respectively. The solid curve (blue and black) in this figure is the calculated matter density of the nuclei and their mirror obtained with the  $p$  ( $sd$ ) model space. The dashed curve is the calculated matter density with  $psd$  ( $psdf$ ) model space. The filled circles are the experimental nucleon density. It is evident from these figures that the calculated matter density distribution for both model space are in good accordance with that of the fitted data, at  $r \leq 5$  fm for  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$ .



**Figure 5.** Matter density distributions (a) for  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$ , (b) for  $^{23}\text{Al}$ - $^{23}\text{Ne}$  mirror nuclei [31, 32]



**Figure 6.** Elastic form factors (a) for  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$ , (b) for  $^{23}\text{Al}$ - $^{23}\text{Ne}$  mirror nuclei

Finally, For the sake of completeness of the comparison, elastic form factors of two pairs of nuclei are calculated using Plane Wave Born Approximation (PWBA). To compare the results of the form factor of the halo nuclei with that of their mirror nuclei, we present the calculated  $C0$  form factor using ckii interaction for  $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$  and usd interaction

for  $^{23}\text{Al}$ - $^{23}\text{Ne}$  nuclei as shown in Figure 6. It is seen from this figure that the charge form factors of the pairs of mirror nuclei are different. Comparing the result of these nuclei, show that the form factors are sensitive to the change of the tail part of the proton density since the ground state proton density is connected with the C0 form factor. As one can see that each black curve and the blue curve in the figures have one diffraction minimum and one diffraction maximum. Also, because the center of mass correction varies depending on the mass number and the size parameter b, there is a discrepancy between the form factors of mirror nuclei.

#### 4. CONCLUSIONS

The relationship between a nucleus' proton skin and the difference between the proton radii of the mirror pair is seen in the current work. Each pair of mirror nuclei has different sizes in terms of their nuclear size, and these differences get linearly larger with increasing mass number A for both interactions. The rms radius of the valence proton was also discovered to be greater than that of the valence neutron in its mirror nucleus. In addition, the results of density distributions show that the two pairs of mirror nuclei have exotic structures. Finally, the form factor is sensitive to the change of the proton density, since the ground state proton density is connected with the C0 form factor and the difference between the form factors of these nuclei is due to the mass correction which depends on the size parameter b.

#### ORCID IDs

©Ruqaya A. Mohammed, <https://orcid.org/0000-0002-6501-453X>; ©Wasan Z. Majeed, <https://orcid.org/0000-0001-6595-1841>

#### REFERENCE

- [1] T. Otsuka, "Emerging concepts in nuclear structure based on the shell model," *Physics*, **4**(1), 258 (2022). <https://doi.org/10.3390/physics4010018>
- [2] H. Jian, Y. Gao, F. Dai, J. Liu, X. Xu, C. Yuan, K. Kaneko, *et al.*, "β-Delayed γ Emissions of  $^{26}\text{P}$  and Its Mirror Asymmetry," *Symmetry*, **13**(12), 2278, (2021). <https://doi.org/10.3390/sym13122278>
- [3] G. Agnelli, Master Degree in Physics, Universita Degli Studi di Milano, 2019. <https://www0.mi.infn.it/~jroca/doc/thesis/thesis-giancarlo-agnelli.pdf>
- [4] I. Angeli, and K. P. Marinova, "Table of experimental nuclear ground state charge radii: An update," *At. Data Nucl. Data Tables*, **99**(1), 69 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.adt.2011.12.006>
- [5] M. Bao, Y. Lu, Y. M. Zhao, and A. Arima, "Predictions of nuclear charge radii," *Phys. Rev. C*, **94**(6), (2016). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.94.064315>
- [6] H. Simon, "The ELISE experiment at FAIR," *Nucl. Phys. A*, **787**(1–4), 102 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2006.12.020>
- [7] A.N. Antonov *et al.*, "The electron-ion scattering experiment ELISE at the International Facility for Antiproton and Ion Research (FAIR) – A conceptual design study," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, **637**(1), 60 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.nima.2010.12.246>
- [8] T. Suda, and M. Wakasugi, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **55**, 417 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.pnpnp.2005.01.008>
- [9] T. Motobayashi, and H. Sakurai, "Research with fast radioactive isotope beams at RIKEN," *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2012**(1), 2012. <https://doi.org/10.1093/ptep/pts059>
- [10] M. Wakasugi *et al.*, "Construction of the SCRIT electron scattering facility at the RIKEN RI Beam Factory," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, **317**, 668 (2013).
- [11] M.K. Gaidarov, I. Moumene, A.N. Antonov, D.N. Kadrev, P. Sarriguren, and E.M. de Guerra, "Proton and neutron skins and symmetry energy of mirror nuclei," *Nucl. Phys. A*, vol. 1004, p. 122061, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2020.122061>
- [12] A. Boso, S.M. Lenzi, F. Recchia, J. Bonnard, S. Aydin, M.A. Bentley, B. Cederwall, *et al.*, "Isospin symmetry breaking in mirror nuclei  $^{23}\text{Mg}$ - $^{23}\text{Na}$ ," *Acta Phys. Pol. B*, **48**(3), 313 (2017). <https://doi.org/10.5506/APhysPolB.48.313>
- [13] J. Ekman, D. Rudolph, C. Fahlander, R.J. Charity, W. Reviol, D.G. Sarantites, V. Tomov, *et al.*, "The A = 51 mirror nuclei  $^{51}\text{Fe}$  and  $^{51}\text{Mn}$ ," *Eur. Phys. J. A*, **9**(1), 13 (2000). <https://doi.org/10.1007/s100500070050>
- [14] K. Wimmer, W. Korten, P. Doornenbal, T. Arici, P. Aguilera, A. Algora, T. Ando, *et al.*, "Shape Changes in the Mirror Nuclei Kr 70 and Se 70," *Phys. Rev. Lett.* **126**(7), 2021. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.072501>
- [15] B.N. Giv, and S. Mohammadi, "Calculating Energy Levels in  $^{49}\text{Mn}$ / $^{49}\text{Cr}$  Mirror Nuclei with OXBASH Code," *Comput. Biol. Bioinforma.*, **5**(5), 70 (2017). <https://doi.org/10.11648/j.cbb.20170505.13>
- [16] F. Sammarruca, "Proton skins, neutron skins, and proton radii of mirror nuclei," *Front. Phys. Front. Phys.* **6**, 90 (2018). <https://doi.org/10.3389/fphy.2018.00090>
- [17] K. Arai, Y. Ogawa, Y. Suzuki, and K. Varga, "Structure of the mirror nuclei  $^9\text{Be}$  and  $^9\text{B}$  in a microscopic cluster model," *Phys. Rev. C - Nucl. Phys.* **54**(1), 132 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.54.132>
- [18] T. De Forest, Jr., and J. D. Walecka, "Electron scattering and nuclear structure", *Adv. Phys.* **15**, 1 (1966). <https://doi.org/10.1080/00018736600101254>
- [19] J.P. Glickman, W. Bertozzi, T.N. Buti, S. Dixit, F.W. Hersman, C.E. Hyde-Wright, M.V. Hynes, *et al.*, "Electron scattering from Be 9", *Phys. Rev. C*, **43**(4), 1740 (1991). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.43.1740>
- [20] R.A. Radhi, "Perturbative role in the inelastic electron scattering from  $^{29}\text{Si}$ ", *Eur. Phys. J. A*, **A34**, 107 (2007). <https://doi.org/10.1140/epja/i2007-10488-0>
- [21] B.A. Brown, R. Radhi, and B. H. Wildenthal, *Physics Reports*, **101**(5), 313 (1983). [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(83\)90001-7](https://doi.org/10.1016/0370-1573(83)90001-7)
- [22] R.A. Radhi, A.K. Hamoudi, and W.Z. Majeed, "Calculation of The Nuclear Matter Density Distributions and Form Factors For The Ground State of P", *Iraqi J. Sci.* **54**(2), 349 (2013). <https://www.iasj.net/iasj/download/47f853b71cc4457e>
- [23] B.A. Brown *et al.*, Oxbash for Windows PC (MSU-NSCL report number 1289) 1 (2005).

- [24] S. Cohen, and D. Kurath, Nucl. Phys. **73**, 1 (1965). [https://doi.org/10.1016/0029-5582\(65\)90148-3](https://doi.org/10.1016/0029-5582(65)90148-3)
- [25] J.P. Elliott, Proc. Roy. Soc. A, **245**, 1240 (1958). <https://doi.org/10.1098/rspa.1958.0072>
- [26] A. Ozawa, T. Suzuki, and I. Tanihata, "Nuclear size and related topics," Nucl. Phys. A, **693**(1–2), 32 (2001). [https://doi.org/10.1016/S0375-9474\(01\)01152-6](https://doi.org/10.1016/S0375-9474(01)01152-6)
- [27] B.A. Brown, and B.H. Wildenthal, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **38**, 29 (1988). <https://doi.org/10.1146/annurev.ns.38.120188.000333>
- [28] E.K. Warburton, J.A. Becker, and B.A. Brown, "Mass systematics for A=29–44 nuclei: The deformed A~32 region", Phys. Rev. C, **41**, 1147 (1990). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.41.1147>
- [29] R.N. Panda, M. Panigrahi, M.K. Sharma, and S.K. Patra, "Evidence of a Proton Halo in  $^{23}\text{Al}$ : A Mean Field Analysis," Phys. At. Nucl. **81**(4), 417 (2018). <https://doi.org/10.1134/S1063778818040154>
- [30] K. Riisager, "Halos and related structures," Phys. Scr. **2013**, 014001 (2013). <https://doi.org/10.1088/0031-8949/2013/T152/014001>
- [31] K. Tanaka, M. Fukuda, M. Mihara, M. Takechi, D. Nishimura, T. Chinda, T. Sumikama, *et al*, "Density distribution of  $^{17}\text{Ne}$  and possible shell-structure change in the proton-rich sd-shell nuclei," Phys. Rev. C, **82**(4), 44309 (2010). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.82.044309>
- [32] F. De-Qing, M. Chun-Wang, M. Yu-Gang, C. Xiang-Zhou, C. Jin-Gen, C. Jin-Hui, G. Wei, *et al*, "One-Proton Halo Structure in  $^{23}\text{Al}$ ," Chinese Phys. Lett. **22**(3), 572 (2005). <https://doi.org/10.1088/0256-307X/22/3/015>

### ЕКЗОТИЧНА СТРУКТУРА ДЗЕРКАЛЬНИХ ЯДЕР $^{17}\text{Ne}$ - $^{17}\text{N}$ ТА $^{23}\text{Al}$ - $^{23}\text{Ne}$

Рукая А. Мохаммед<sup>а</sup>, Васан З. Маджид<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Фізичний факультет, Науковий коледж, Багдадський університет, Ірак

З точки зору ядра плюс валентного нуклона, досліджуються розрахунки моделі оболонки з використанням двох модельних просторів і взаємодій, взаємозв'язок між протонною оболонкою ядра та різницею радіусів протонів дзеркальних пар ядер з однаковим масовим числом. У даній роботі будуть досліджені дві пари дзеркальних ядер:  $^{17}\text{Ne}$  -  $^{17}\text{N}$  і  $^{23}\text{Al}$  -  $^{23}\text{Ne}$ . Для ядер  $^{17}\text{Ne}$  -  $^{17}\text{N}$  прийнято р-оболонку та змішування psd-орбіт із взаємодіями Коена-Курата (skii) та psdsu3. У той час як для  $^{23}\text{Al}$  -  $^{23}\text{Ne}$  оболонки sd і sdpf прийнято з універсальною моделлю оболонки (USD) і взаємодіями sdpfwa. Також досліджуються розподіли густини основного стану, пружні формфактори та середньоквадратичні радіуси ядер цих пар та порівнюються з наявними експериментальними даними. Загалом було виявлено, що середньоквадратичний радіус валентного протона(ів) більший, ніж радіус валентного нейтрона(ів) у його дзеркальному ядрі. Результати показують, що ці ядра мають екзотичну структуру гало або шкіри.

**Ключові слова:** дзеркальні ядра, товщина оболонки протонів і нейтронів, розподіл густини, екзотичне ядро