

ISSN 2222-5617

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

*Вісник*  
*Харківського*  
*Національного*  
*Університету*  
*імені В. Н. Каразіна*

---

---

**Серія “Фізика”**

Випуск 34

Серія започаткована 1998 р.

Харків 2021

УДК 530.1/539.8

Вісник містить статті, присвячені сучасному стану теоретичних та експериментальних досліджень у галузі фізики. Видання призначене для науковців, викладачів, аспірантів та студентів фізичних спеціальностей вищих навчальних закладів та наукових установ.

Видання є фаховим виданням у галузі фіз.-мат. наук (104 Фізика та астрономія) наказ МОН України № 409 від 17.03.2020.

Затверджено до друку рішенням Вченої ради Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна (протокол №6 від 31 травня 2021 р.)

### **Головний редактор**

**Вовк Р.В.** - доктор фіз. - мат. наук, професор, ХНУ імені В.Н. Каразіна, Україна

Заступник головного редактора

Пойда В.П. - доктор тех. наук, професор, ХНУ імені В.Н. Каразіна, Україна

Відповідальний секретар

Коршак В.Ф. - канд. фіз. - мат. наук, доцент, ХНУ імені В.Н. Каразіна, Україна

Технічний редактор

Мозуль К.О. - ХНУ імені В.Н. Каразіна, Україна

### **Редакційна колегія**

Бойко Ю.І. - доктор фіз. - мат. наук, професор, ХНУ імені В.Н. Каразіна, Україна

Гуревич Ю.Г. - доктор фіз. - мат. наук, професор, Дослідницький центр, Мексика

Зиман З.З. - доктор фіз. - мат. наук, професор, ХНУ імені В.Н. Каразіна, Україна

Кагановський Ю.С. - доктор фіз. - мат. наук, професор, Бар - Іланський університет, Ізраїль

Камзін О.С. - доктор фіз. - мат. наук, професор, ФТІ імені Іоффе, Росія

Кунцевич С.П. - доктор фіз. - мат. наук, професор, ХНУ імені В.Н. Каразіна, Україна

Лазоренко О.В. - доктор фіз. - мат. наук, доцент, ХНУ імені В.Н. Каразіна, Україна

Пархоменко О.О. - доктор фіз. - мат. наук, с.н.с., ННЦ ХФТІ НАНУ, Україна

Петченко О.М. - доктор фіз. - мат. наук, професор, ХНУ МГ ім. О.М. Бекетова МОН України

Портной М.Ю. - доктор фізики, професор, університет Ексетеру, Великобританія

Рошко С.М. - доктор фізики, професор, Лондонський центр нанотехнологій, Великобританія

Соколенко В.І. - доктор фіз. - мат. наук, с.н.с., ННЦ ХФТІ НАНУ, Україна

Хронеос Олександр - доктор фізики, професор, Імперіал коледж, Великобританія

Фегер Олександр - доктор фіз. - мат. наук, професор, інститут фізики університету імені Шафарика,

Кошице, Словачія

Федоров П.М. - доктор фіз. - мат. наук, професор, ХНУ імені В.Н. Каразіна, Україна

Шехтер Роберт - доктор фіз. - мат. наук, професор, Гетеборгський університет, Швеція

Шкловський В.А. - доктор фіз. - мат. наук, професор, ХНУ імені В.Н. Каразіна, Україна

Шкуратов Ю.Г. - член-кор. НАН України, доктор фіз. - мат. наук, професор,

ХНУ імені В.Н. Каразіна, Україна

Ямпольський В.О. - член-кор. НАН України, доктор фіз. - мат. наук, професор, ХНУ імені

В.Н. Каразіна, Україна

Адреса редакції:

Україна, 61022, Харків, майдан Свободи, 4, Харківський національний університет імені

В.Н. Каразіна, фізичний факультет, 057-707-53-83, physics.journal@karazin.ua

Статті пройшли внутрішнє та зовнішнє рецензування.

Свідоцтво про державну реєстрацію КВ №21573-11473Р від 20.08.2015

© Харківський національний університет  
імені В.Н. Каразіна, оформлення, 2021

ISSN 2222-5617

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE

*The journal of V.N. Karazin*

*Kharkiv*

*National*

*University*

---

---

**Series “Physics”**

Volume 34

The series has started 1998 p.

Kharkiv 2021

UDC 530.1/539.8

The journal contains articles on the current state of theoretical and experimental research in the field of physics. The publication is intended for researchers, teachers and students of physical specialties of higher education and research institutions.

The publication is a professional Edition in the field of physics and mathematics science (104 Physics and astronomy) ordered MES of Ukraine #409 from 17.03.2020.

Approved for publication by the decision of the Academic Council of Kharkiv Karazin National University. (Minutes №6 dated May 31, 2021)

### **Editor-in-Chief**

**Vovk R.V.** - Dr. Sci., Prof., V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Deputy Editor-in-Chief

**Poida V.P.** - Dr. Sci., Prof., V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Assistant Editor

**Korshak V.F.** – Ph.D., Assoc. Prof., V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Technical Editor

**Mozul K.O.** – V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

### **Editorial Board**

**Boiko Yu.I.** - Dr. Sci., Prof., V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

**Gurevich Yu.G.** - Dr. Sci., Prof., Center for Research and Advanced, Mexico

**Zyman Z.Z.** - Dr. Sci., Prof., V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

**Kaganovskiy Yu.S.** - Dr. Sci., Prof., Bar - Ilan University, Israel

**Kamzin O.S.** - Dr. Sci., Prof., Ioffe Institute, Russia

**Kuncevich S.P.** - Dr. Sci., Prof., V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

**Lazorenko O.V.** - Dr. Sci., Assoc. Prof., V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

**Parhomenko O.O.** - Dr. Sci., Prof., NSC "Kharkov Institute of Physics & Technology", Ukraine

**Petchenko O.M.** - Dr. Sci., Prof., O.M.Beketov National University of Urban Economy, Ukraine

**Portnoi M. Yu.** - Dr. Sci., Prof., University of Exeter, UK

**Rozhko S.M.** - Dr. Sci., Prof., London Centre for Nanotechnology, UK

**Chroneos A.** - Dr. Sci., Prof., Imperial Colledge, UK

**Feher A.** - Dr. Sci., Prof., Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Kosice, Slovakia

**Fedorov P.M.** - Dr. Sci., Prof., V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

**Shekhter R.I.** - Dr. Sci., Prof., University of Goteborg, Sweden

**Shklovskij V. A.** - Dr. Sci., Prof., V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

**Shkuratov J.G.**- Corresponding Member of the NAS of Ukraine, Dr. Sci., Prof., V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

**Sokolenko V.I.** - Dr. Sci., Senior Researcher, NSC KIPT, Ukraine

**Yampol'skii V. A.** - Corresponding Member of the NAS of Ukraine, Dr. Sci., Prof., V.N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine

Editorial address:

Svobody Sq. 4, 61022, Kharkiv, Ukraine, V.N. Karazin Kharkiv National University, Department of Physics, 057-707-53-83, physics.journal@karazin.ua

All articles reviewed.

Certificate of registration KB number 21573-11473P on 20.08.2015

© V.N. Karazin Kharkiv National University,  
design, 2021

ISSN 2222-5617

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ

*Вестник*  
*Харьковского*  
*Национального*  
*Университета*  
*имени В. Н. Каразина*

---

---

**Серия “Физика”**

Выпуск 34

Серия основана 1998 г.

Харьков 2021

УДК 530.1/539.8

Вестник содержит статьи, посвященные современному состоянию теоретических и экспериментальных исследований в области физики. Издание предназначено для ученых, преподавателей, аспирантов и студентов физических специальностей высших учебных заведений и научных организаций.

Издание является профессиональным изданием в области физ.-мат. наук (104 физика и астрономия) приказ МОН Украины №409 от 17.03.2020.

Утверждено в печать решением Ученого совета Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина (протокол №6 от 31 мая 2021 г.)

### **Главный редактор**

**Вовк Р.В.** - доктор физ. - мат. наук, профессор, ХНУ имени В.Н. Каразина, Украина

Заместитель главного редактора

Пойда В.П. - доктор тех. наук, профессор, ХНУ имени В.Н. Каразина, Украина

Ответственный секретарь

Коршак В.Ф. - канд. физ. - мат. наук, доцент, ХНУ имени В.Н. Каразина, Украина

Технический редактор

Мозуль К.А. - ХНУ имени В.Н. Каразина, Украина

### **Редакционная коллегия**

Бойко Ю.И. - доктор физ. - мат. наук, профессор, ХНУ имени В.Н. Каразина, Украина

Гуревич Ю.Г. - доктор физ. - мат. наук, профессор, Исследовательский центр, Мексика

Зыман З.З. - доктор физ. - мат. наук, профессор, ХНУ имени В.Н. Каразина, Украина

Кагановский Ю.С. - доктор физ. - мат. наук, профессор, Бар-Иланский университет, Израиль

Камзин О.С. - доктор физ. - мат. наук, профессор, ФТИ имени Иоффе, Россия

Кунцевич С.П. - доктор физ. - мат. наук, профессор, ХНУ имени В.Н. Каразина, Украина

Лазоренко О.В. - доктор физ. - мат. наук, доцент, ХНУ имени В.Н. Каразина, Украина

Пархоменко О.О. - доктор физ. - мат. наук, с.н.с., ННЦ ХФТИ НАНУ, Украина

Петченко О.М. - доктор физ. - мат. наук, профессор, ХНУ МГ им. О.М. Бекетова МОН Украины

Портной М.Ю. - доктор физики, профессор, университет Эксетера, Великобритания

Рошко С.М. - доктор физики, профессор, Лондонский центр нанотехнологий, Великобритания

Соколенко В.І. - доктор физ. - мат. наук, с.н.с., ННЦ ХФТИ НАНУ, Украина

Хронеос Александр - доктор физики, профессор, Империял колледж, Великобритания

Фегер Александр - доктор физ. - мат. наук, профессор, институт физики университета имени

Шафарика, Кошице, Словакия

Федоров П.М. - доктор физ. - мат. наук, профессор, ХНУ имени В.Н. Каразина, Украина

Шехтер Роберт - доктор физ. - мат. наук, профессор, Гетеборгский университет, Швеция

Шкловский В.А. - доктор физ. - мат. наук, профессор, ХНУ имени В.Н. Каразина, Украина

Шкуратов Ю.Г. - член-кор. НАН Украины, доктор физ. - мат. наук, профессор,

ХНУ імені В.Н. Каразіна, Україна

Ямпольский В.О. - член-кор. НАН Украины, доктор физ. - мат. наук, профессор, ХНУ имени В.Н. Каразина, Украина

Адрес редакции:

Украина, 61022, Харьков, майдан Свободы, 4, Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина, физический факультет, 057-707-53-83, physics.journal@karazin.ua

Статьи прошли внутреннее и внешнее рецензирование.

Свидетельство о государственной регистрации КВ №21573-11473Р от 20.08.2015

© Харьковский национальный университет  
имени В.Н. Каразина, оформление, 2021

# Content

<i>K.A. Mozul, E.V. Shurinova</i> Cationic distribution in nanoparticles of ferrites of $Zn_xFe_{3-x}O_4$ composition	10
<i>M.A. Savchenko, E.M. Savchenko</i> To the microscopic theory of the superconductive phase in antiferromagnetic metal compounds	15
<i>Yu.I. Boyko, V.V. Bogdanov, R.V. Vovk, B.V. Grinev</i> Photo-induced "high-temperature" superconductivity of multicomponent metal-oxide compounds	19
<i>Ye.V. Ftomov</i> Rotation of crystal lattice induced by the development of dislocation slip in flat two-dimensional polycrystalline samples of aluminum with a "pancake" grain structure	25
<i>N.O. Herashchenko, K.E. Nemchenko, T.G. Vikhtinskaya, S.Yu. Rogova</i> Sound resonances in supercritical and superfluid helium	33
<i>J. Amrit, T. Medintseva, K. Nemchenko, T. Vikhtinskaya</i> Analytical consideration of particle transport in 1D nanostructures	36
<i>V. Maksymych, D. Calus, R. Shvets, P. Chabecki, I. Bordun, N. Pokladok, F. Ivashchyshyn</i> Properties and possibilities of practical applications of GaSe crystal intercalated with $\beta$ -cyclodextrin doped with iodine	39
<i>E. Chłopocka, E. Nowak</i> The influence of copper on zinc oxide properties – a review	43
<i>P.K. Sikorski, I.O. Anisimov</i> Regular and stochastic dynamics of the Duffing oscillator excited by the harmonic force	47

## Зміст

<i>К.О. Мозуль, О.В. Шурінова</i> Катіонний розподіл у наночастинках феритів складу $Zn_xFe_{3-x}O_4$	10
<i>М.А.Савченко, О.М. Савченко</i> До мікроскопічної теорії надпровідної фази в антиферромагнітних металевих сполуках	15
<i>Ю.І. Бойко, В.В. Богданов, Р.В. Вовк, Б.В. Гриньов</i> Фотоіндукована «високотемпературна» надпровідність полікомпонентних метал-оксидних з'єднань	19
<i>Є.В. Фтьомов</i> Поворот кристалічної решітки внаслідок розвитку дислокаційного ковзання в плоских двовимірних полікристалічних зразках алюмінію з “млинцевою” зерненою структурою	25
<i>Н.О. Геращенко, К.Е. Немченко, Т.Г. Віхтинська, С.Ю.Рогова</i> Звукові резонанси в надкритичному і надрідкому гелії	33
<i>Й. Амріт, Т. Медінцева, К. Немченко, Т. Віхтинська</i> Аналітичний розгляд переносу частинок в одновимірних наноструктурах	39
<i>В. Максимич, Д. Цалус, Р.Швець, П. Хабецькі, І. Бордун, Н. Покладок, Ф. Івацшишин</i> Властивості і можливості практичного застосування кристалу GaSe інтеркальованого $\beta$ -циклодекстрином допованого йодом	39
<i>Е. Хлопоцька, Е. Новак</i> Вплив міді на властивості оксиду цинку – огляд	43
<i>Ф.К. Сікорський, І.О. Анісімов</i> Регулярна та стохастична динаміка осцилятора Дюффінга, збудженого гармонічною силою	47



## Содержание

<i>К.А. Мозуль, Е.В. Шуринова</i> Катионное распределение в наночастицах ферритов состава $Zn_xFe_{3-x}O_4$	10
<i>М.А.Савченко, О.М.Савченко</i> К микроскопической теории сверхпроводящей фазы в антиферромагнитных металлических соединениях	15
<i>Ю.И. Бойко, В.В. Богданов, Р.В. Вовк, Б.В. Гринев</i> Фотоиндуцированная «высокотемпературная» сверхпроводимость поликомпонентных металл-оксидных соединений	19
<i>Е.В. Фтёмов</i> Разворот кристаллической решетки вследствие развития дислокационного скольжения в плоских двумерных поликристаллических образцах алюминия с “блинной” зеренной структурой	25
<i>Н.О. Геращенко, К.Е. Немченко, Т.Г. Вихтинская, С.Ю.Рогова</i> Звуковые резонансы в сверхкритическом и сверхтекучем гелии	33
<i>Я. Амрит, Т. Мединцева, К. Немченко, Т. Вихтинская</i> Аналитическое рассмотрение переноса частиц в одномерных наноструктурах	36
<i>В. Максимич, Д. Цалус, Р.Швец, П. Хабецкий, И. Бордун, Н. Покладок, Ф. Иваццишин</i> Свойства и возможности практического применения кристалла GaSe интеркалированного $\beta$ -циклодекстрином допированного йодом	39
<i>Э. Хлопоцка, Э. Новак</i> Влияние меди на свойства оксида цинка – обзор	43
<i>Ф.К. Сикорский, И.А. Анисимов</i> Регулярная и стохастическая динамика осциллятора Дюффинга, возбуждаемого гармонической силой	47

PACS: 61.50.Ah

UDC: 539.26, 544.022

## Катіонний розподіл у наночастинках феритів складу $Zn_xFe_{3-x}O_4$

К.О. Мозуль, О.В. Шурінова

*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, м. Свободи 4, 61022, Харків, Україна  
mozul@karazin.ua*

ORCID: 0000-0003-3373-8821, 0000-0003-3616-9775

DOI: 10.26565/2222-5617-2021-34-01

Методом хімічної конденсації синтезовано нанодисперсні порошки цинкзаміщеного магнетиту  $Zn_xFe_{3-x}O_4$  з вмістом іонів цинку  $x = 0.0 \div 0.5$ . Рентгенівські спектри показали однофазність порошків та їх належність до кубічної структури фериту типу шпінелі. За результатами рентгенівських та електронно-мікроскопічних досліджень визначені розміри частинок для усіх синтезованих систем. Середній розмір частинок феритів за даними отриманими з рентгенівських спектрів з використанням формули Селякова-Ширера склав  $\sim 7$  нм, при максимальному розмірі частинок близько 10 нм. За даними мікроскопії діапазон розмірів частинок склав  $3 \div 13$  нм із середнім значенням у 6.5 нм. Проведено дослідження катіонного розподілу двома способами. В якості першого способу було обрано метод Пуа, який заснований на зв'язку між параметром решітки  $a$  й характеристичними відстанями катіон-аніон. Другим способом було вибрано визначення катіонного розподілу за результатами вимірювання намагніченості. При цьому використовувалася формула зв'язку питомої намагніченості при 0 К з числом магнетонів Бора на формульну одиницю. При цьому в формулу була введена поправка, пов'язана з малим розміром частинок і, відповідно, великим пайовим внеском приповерхневої області зі «скошеною» магнітною структурою. Було виміряно параметри кристалічної решітки і намагніченість. Отримані дані лягли в основу розрахунків катіонного розподілу, згідно з яким ферити з концентрацією  $x \leq 0.2$  мають обернену структуру шпінелі, тобто іони цинку локалізуються тільки в октаедричних позиціях, а при концентрації  $0.3 \leq x \leq 0.5$  – змішану структуру шпінелі з мінімальним ступенем оберненості 80% при концентрації іонів цинку  $x = 0.5$ .

**Ключові слова:** шпінель, катіонний розподіл, параметр решітки, намагніченість, ступінь оберненості.

## Cationic distribution in nanoparticles of ferrites of $Zn_xFe_{3-x}O_4$ composition

К.А. Mozul, E.V. Shurinova

*V. N. Karazin Kharkiv National University, 4 Svobody Sq., Kharkiv 61022, Ukraine*

Nanodispersed powders of zinc-substituted magnetite  $Zn_xFe_{3-x}O_4$  with the content of zinc ions  $x = 0.0 \div 0.5$  were synthesized by the method of chemical condensation. X-ray spectra showed single-phase powders and their belonging to the cubic structure of spinel-type ferrite. According to the results of X-ray and electron microscopic studies, the particle sizes for all synthesized systems were determined. The average particle size of ferrites according to data obtained from X-ray spectra using the Selyakov-Shearer formula was  $\sim 7$  nm, with a maximum particle size of about 10 nm. According to microscopy, the particle size range was  $3 \div 13$  nm with an average value of 6.5 nm. The study of cation distribution was carried out in two ways. The Poix method was chosen as the first method, which is based on the relationship between the lattice parameter  $a$  and the characteristic cation-anion distances. The second method was chosen to determine the cation distribution by measuring the magnetization. The formula for coupling the specific magnetization at 0 K with the number of Bohr magnetons per formula unit was used. An amendment was introduced into the formula due to the small particle size and, accordingly, the large share contribution of the near-surface region with a "canted" magnetic structure. The parameters of the crystal lattice and the magnetization were measured. The obtained data formed the basis of cation distribution calculations, according to which ferrites with a concentration of  $x \leq 0.2$  have an inverted spinel structure, ie zinc ions are localized only in octahedral positions, and at a concentration of  $0.3 \leq x \leq 0.5$  – a mixed spinel structure with a minimum degree of inversion of 80% at a concentration of zinc ions  $x = 0.5$ .

**Keywords:** spinel, cation distribution, lattice parameter, magnetization, degree of inversion.

## Катионное распределение в наночастицах ферритов состава



К.А. Мозуль, Е.В. Шурінова

*Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина, м. Свободы 4, 61022, Харьков, Украина*

Методом химической конденсации синтезированы нанодисперсные порошки цинкзамещенного магнетита  $Zn_xFe_{3-x}O_4$  с содержанием ионов цинка  $x=0.0\div 0.5$ . Рентгеновские спектры показали однофазность порошков и их принадлежность к кубической структуре феррита типа шпинели. По результатам рентгеновских и электронно-микроскопических исследований определены размеры синтезированных систем. Средний размер частиц ферритов по данным, полученным из рентгеновских спектров с использованием формулы Селякова-Ширера, составил  $\sim 7$  нм, при максимальном размере частиц порядка 10 нм. По данным микроскопии размеры частиц находятся в диапазоне  $3 \div 13$  нм со средним значением в 6.5 нм. Проведено исследование катионного распределения двумя способами. В качестве первого способа выбран метод Пуа, основанный на связи между параметром решетки  $a$  и характеристическими расстояниями катион-анион. Вторым способом было выбрано определение катионного распределения по результатам измерения намагниченности. При этом использовалась формула связи удельной намагниченности при 0 К с числом магнетонов Бора на формульную единицу. При этом в формулу была введена поправка, связанная с малым размером частиц и, соответственно, большим долевым вкладом приповерхностной области со «скошенной» магнитной структурой. Измерены параметры кристаллической решетки и намагниченность. Полученные данные легли в основу расчетов катионного распределения, согласно которому ферриты с концентрацией  $x \leq 0.2$  имеют обращенную структуру шпинели, то есть ионы цинка локализируются только в октаэдрических позициях, а с  $0.3 \leq x \leq 0.5$  – смешанную структуру шпинели с минимальной степенью обращенности 80 % при концентрации ионов цинка  $x = 0.5$ .

**Ключевые слова:** шпинель, катионное распределение, параметр решетки, намагниченность, степень обращенности

### Вступ

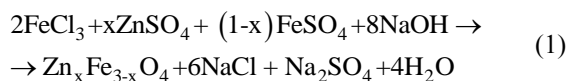
Основні властивості феритів зі структурою шпінелі обумовлені не тільки природою металевих іонів що входять до складу фериту, але і, в значній мірі, їх розподілом по тетраедричних (А) і октаедричних (В) міжвузлях. Кількісною характеристикою катіонного розподілу служить ступінь оберненості  $I$ , яка визначається як число 2-х валентних іонів в октаедрі, або число 3-х валентних іонів в тетраедрах на формульну одиницю фериту  $MeFe_2O_4$ ;  $I=1$  відповідає оберненій,  $I=0$  – нормальній шпінелі, при  $0 < I < 1$  має місце змішана структура.

При утворенні твердого розчину феритів з протилежним ступенем оберненості характер її зміни в залежності від хімічного складу може виявитися досить складним. Так, в системі цинкзаміщеного літійового фериту  $Zn_yLi_{0.5-0.5y}Fe_{2.5-0.5y}O_4$  [1] при переході від оберненої структури фериту літію  $Fe^{3+}[Li_{0.5}^{+}Fe_{2.5}^{3+}]O_4$  до нормальної структури фериту цинку  $Zn^{2+}[Fe_2^{3+}]O_4$  ступінь оберненості зменшується нелінійно, лише при  $y = 0,4$  всі іони цинку займають, відповідно до теоретичними прогнозами [2], тетраедричні позиції, в той час як при менших концентраціях вони локалізуються також в октаедрах, причому для  $y < 0,3$  октаедрична координація іонів  $Zn^{2+}$  переважає.

Метою даної роботи було дослідження катіонного розподілу в нанокристалах цинкзамещенного магнетиту  $Zn_xFe_{3-x}O_4$ .

### 1. Метод отримання і атестація експериментальних зразків

Нанодисперсні порошки феритів складу  $Zn_x^{2+}Fe_{1-x}^{2+}Fe_2^{3+}O_4$  з концентрацією  $x=0; 0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5$  були отримані методом хімічної конденсації з водних розчинів солей феритоутворюючих компонентів в розчині лугу [3] відповідно до реакції:



Отриману в результаті реакції суміш витримують близько двох годин при  $80^\circ C$  в водяній бані при постійному перемішуванні, потім до двох діб для остаточного «дозрівання» осаду, після чого багаторазово промивають дистильованою водою до  $pH = 7,5-8,0$  та на (2-3) хв розміщують в ультразвуковий диспергатор для запобігання можливої агрегації феритових частинок.

Рентгенівські спектри зразків, отримані на автоматичному рентгенівському дифрактометрі ДРОН-4 з джерелом монохроматизованого Со-випромінювання, оброблялися методом Ритвельда з використанням прикладних програм [4]. Характер дифрактограм підтвердив однофазність порошків і їх належність до кубічної структури фериту типу шпінелі (просторова група  $Fd3m(227)$ ).

З дифрактограм з використанням формули Селякова ( $D=K\lambda/\beta \cos\theta$ , [5]) були визначені середні розміри частинок для всіх досліджених складів. Отримані значення лежать в інтервалі  $5,8 \div 10,0$  нм. Цей результат узгоджується з результатом електронно-мікроскопічних досліджень, які показали, що діапазон значень  $D = 3 \div 13$  нм, середнє значення  $\langle D \rangle \approx 6,5$  нм. При цьому близько 80% частинок мають розмір  $5,0 \div 9,0$  нм.

### 2. Експериментальні результати та їх аналіз

Досліджувана система  $Zn_xFe_{3-x}O_4$  являє собою твердий розчин феритів заліза ( $Fe^{3+}[Fe^{2+}Fe^{3+}]O_4$  – магнетит), який має структуру оберненої шпінелі, і цинку ( $Zn^{2+}[Fe_2^{3+}]O_4$ ), структура якого – нормальна.

Для визначення катіонного розподілу в нанокристалах  $Zn_xFe_{3-x}O_4$  використовувалися два підходи. Перший з них (метод Пуа [6]) заснований на зв'язку між параметром кристалічної решітки  $a$  й характеристичними відстанями катіон-аніон.

$$a = 1,5396\alpha + 2,6667\beta [7]. \quad (2)$$

Тут  $\alpha$ - відстань для іонів в тетраедричних позиціях,  $\beta$  – для іонів в октаедричних позиціях.

Значення  $\alpha$  та  $\beta$  для катіонів, що входять до складу досліджуваної системи, наведені в табл. 1.

Таблиця 1.

Характеристичні відстані катіон-аніон [7]

Катіон	$\alpha$ , Å	$\beta$ , Å
Fe <sup>2+</sup>	2.003	2.18
Fe <sup>3+</sup>	1.9	2.025
Zn <sup>2+</sup>	1.991	2.140

Якщо в даній кристалографічній позиції знаходяться катіони не одного виду, то використовується величина ефективної відстані

$$\alpha_{ef} = \frac{\sum n_i \alpha_i}{\sum n_i} \quad \beta_{ef} = \frac{\sum n_i \beta_i}{\sum n_i}, \quad (3)$$

де  $n_i$  - мольна доля  $i$ -катіона в даній позиції,  $\sum n_i = 1$  для тетраедричних позицій,  $\sum n_i = 2$  для октаедричних позицій шпінелі.

У разі, коли досліджувана система являє собою твердий розчин (систему заміщення) типу обернена - нормальна шпінель, параметр решітки  $a$  буде залежати як безпосередньо від концентрації заміщуючих іонів, так і від ступеня оберненості фериту:

$$a = a_1 + (a_1' - a_1)x + (a_2' - a_1)(1-x) [1] \quad (4)$$

Тут  $a_1$ - параметр решітки вихідного фериту;  $a_1'$ - параметр решітки фериту з концентрацією заміщуючих іонів  $x=1$  і тим же ступенем оберненості, що і у вихідного фериту;  $a_2'$  - параметр решітки фериту з  $x=0$  і ступенем оберненості, протилежній до  $I$  вихідного фериту.

У даній роботі для визначення ступеню оберненості структури  $I$  в нанокристалах цинкзаміщеного магнетиту  $Zn_xFe_{3-x}O_4$  використовувалися формули (3) – (4) і експериментально отримані значення параметра кристалічної решітки. Залежність параметра  $a$  від концентрації цинку представлена на рис.1 спільно з передбачуваною лінійною залежністю для макроаналогів. величини  $a_1'$ - та  $a_2'$  у рівнянні (4) відповідають гіпотетичним розподілам  $Fe^{3+} [Zn^{2+}Fe^{3+}]O_4$  та  $Fe^{2+} [Fe_2^{3+}]O_4$ .

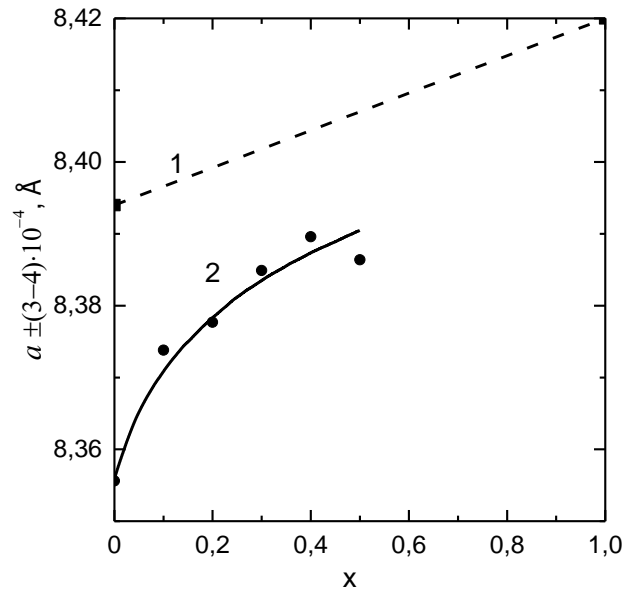


Рис. 1. Залежність параметра кристалічної решітки феритів складу  $Zn_xFe_{3-x}O_4$  від концентрації іонів цинку:  
1 макрокопічний аналог;  
2 нанодисперсні порошкові зразки.

Катіонний розподіл було визначено також на підставі результатів вимірювання намагніченості. Слід зазначити, що в досліджуваному інтервалі концентрацій ( $x = 0 \div 0,5$ ) не спостерігається типова для макроаналога явно виражена регулярна залежність намагніченості від вмісту цинку [8].

Для розрахунку використовувалася формула, що зв'язує питому намагніченість  $\sigma$  при  $T=0$  К з числом магнетонів Бора  $n_B$  на формульну одиницю шпінелі  $MeFe_2O_4$

$$n_B = \frac{M}{N_A \mu_B} \sigma, [9] \quad (5)$$

де  $M$ -молярна маса речовини,  $N_A$  – число Авогадро. При цьому іону  $Fe^{2+}$  приписувалося деяке ефективне значення магнітного моменту  $n_B \neq 4\mu_B$ , яке визначалось за формулою (5) виходячи з реального значення намагніченості нанокристалів магнетиту, нижчого, ніж для макроаналога через «скошеність» магнітної структури в поверхневому шарі малих частинок [10] –  $n_B^{ef}(Fe^{2+}) = 2.77 \mu_B$ . Записавши формулу досліджуваного фериту у вигляді  $Zn_\delta^{2+}Fe_{1-\delta}^{3+} [Zn_{x-\delta}^{2+}Fe_{1-x}^{2+}Fe_{1+\delta}^{3+}]O_4$ , отримуємо для результуючого магнітного моменту

Таблиця 2.

Катіонний розподіл в нанокристалах системи  $Zn_xFe_{3-x}O_4$

x	a, Å	a <sub>1</sub> , Å	a <sub>2</sub> , Å	I <sub>(a)</sub>	σ, А·м <sup>2</sup> кг <sup>-1</sup>	n <sub>B</sub> <sup>ef</sup> , μВ	I <sub>(σ)</sub>	$\langle I \rangle = \frac{I(a) + I(\sigma)}{2}$	Катіонний розподіл
0.0	8.355	8.378	8.484	1	66.7	2.77	1	1	Fe <sup>3+</sup> [Fe <sup>2+</sup> Fe <sup>3+</sup> ]O <sub>4</sub>
0.1	8.374			1.03	56.1	2.34	1.01	1.02	Fe <sup>3+</sup> [Zn <sub>0.1</sub> <sup>2+</sup> Fe <sub>0.9</sub> <sup>2+</sup> Fe <sup>3+</sup> ]O <sub>4</sub>
0.2	8.378			0.997	54.3	2.27	0.995	0.996	Fe <sup>3+</sup> [Zn <sub>0.2</sub> <sup>2+</sup> Fe <sub>0.8</sub> <sup>2+</sup> Fe <sup>3+</sup> ]O <sub>4</sub>
0.3	8.385			0.946	74.4	3.12	0.871	0.909	Fe <sub>0.91</sub> <sup>3+</sup> Zn <sub>0.09</sub> <sup>2+</sup> [Zn <sub>0.21</sub> <sup>2+</sup> Fe <sub>0.7</sub> <sup>2+</sup> Fe <sub>1.09</sub> <sup>3+</sup> ]O <sub>4</sub>
0.4	8.390			0.882	57.6	2.43	0.923	0.903	Fe <sub>0.9</sub> <sup>3+</sup> Zn <sub>0.1</sub> <sup>2+</sup> [Zn <sub>0.3</sub> <sup>2+</sup> Fe <sub>0.6</sub> <sup>2+</sup> Fe <sub>1.1</sub> <sup>3+</sup> ]O <sub>4</sub>
0.5	8.386			0.779	75.5	3.2	0.819	0.799	Fe <sub>0.8</sub> <sup>3+</sup> Zn <sub>0.2</sub> <sup>2+</sup> [Zn <sub>0.3</sub> <sup>2+</sup> Fe <sub>0.5</sub> <sup>2+</sup> Fe <sub>1.2</sub> <sup>3+</sup> ]O <sub>4</sub>

$$n_B^{ef} = n_B^{ef}(Fe^{2+})(1-x) + n_B(Fe^{3+})(1+\delta) - n_B(Fe^{3+})(1-\delta) = 2.77(1-x) + 10\delta \quad (6)$$

звідки

$$\delta = \frac{n_B^{ef} - 2.77(1-x)}{10} = \frac{M\sigma / 5581 - 2.77(1-x)}{10} \quad (7)$$

Ступінь оберненості  $I = 1 - \delta$ .

У табл. 2 наведено вихідні експериментальні дані і результати розрахунків катіонного розподілу, отримані з використанням двох зазначених підходів, на рис.2 – залежність ступеня оберненості структури фериту від вмісту іонів цинку.

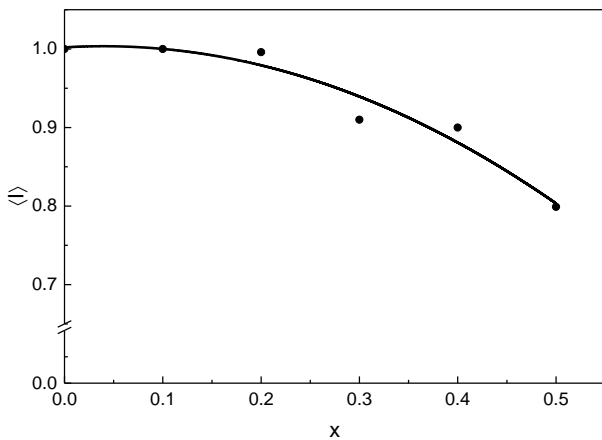


Рис. 2. Залежність ступеня оберненості структури фериту  $Zn_xFe_{3-x}O_4$  від вмісту заміщуючих іонів.

Як видно з наведених даних, при концентрації  $x \leq 0.2$  іони  $Zn^{2+}$  локалізуються тільки в октаедричних позиціях, тобто структура оберненої шпінелі зберігається. При подальшому збільшенні вмісту цинку ступінь оберненості зменшується і при  $x = 0.5$  становить 80% фериту від вмісту іонів цинку.

### Висновки

1. Шляхом дослідження параметрів решітки і намагніченості нанокристалічної феритової системи заміщення  $Zn_xFe_{3-x}O_4$  з розміром частинок біля нижньої межі нанометрового діапазону показано, що, всупереч схильності іонів  $Zn^{2+}$  до тетраедричної координації, вони локалізуються переважно в октаедричних позиціях аж до максимальної дослідженої концентрації  $x=0.5$ .

### References

1. T.R. Tatarchuk, NB Hamanyuk, DV Protsky. Solid State Physics and Chemistry, 9 (2), 363-367, (2008) (Т.Р. Татарчук, Н.Б. Гаманюк, Д.В. Процький. Фізика і хімія твердого тіла, 9 (2), 363-367, (2008)). [In Russian]
2. S. Krupička. Physik der Ferrite und der Verwandten magnetischen oxide, (Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH, 1973) 780 P. <https://doi.org/10.1007/978-3-322-83522-2>
3. Z. Sizova, A. Krishtal', E. Levitin, A. Koval' Abstracts of Paper of the VIII International Conference «Physical Phenomene in Solids», Kharkiv, Ukraine, 143, (2007).
4. E. Shelekhov, T. Sviridova. Met. Sci. Heat Treat., 42 (7), 309-313 (2000). <https://doi.org/10.1007/BF02471306>
5. N. Kachanov, L. Mirkin. Rentgenostrukturnyy analiz. Prakticheskoye rukovodstvo. (Mashgiz, Moscow, 1960) 215 p. (Н. Качанов, Л. Миркин. Рентгеноструктурный анализ. Практическое руководство. (Машгиз, Москва, 1960) 215 с). [In Russian]
6. Poix P. Compt. Rend. Acad., 292 (5), 1191-1196, (1981).

7. S.S. Lisnyak, M.P. Matkivskyy, I.Y. Perkatyuk. Ukr. khym. zhurn., **69** (8). 88-93, (2003). (С.С. Лісняк, М.П. Матківський, І.Й. Перкатюк. Укр. хим. журн., **69** (8). 88-93, (2003)). [In Russian]
8. Y. Sitidze, H. Sato. *Ferrites*. (Mir, Moscow, 1964). 407 p. (Ю. Сигидзе, Х. Сато. *Ферриты*. (Мир, Москва, 1964). 407 с). [In Russian]
9. J. Smit, J. Wijn. *Ferrites. Physical properties of ferrimagnetic oxids in relation to their technical applications*. (Philips Technical Library, 1959) 369 p.
10. J. Coey. Phys. Rev. Lett. **27** (17), 1140-1142, (1971). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.27.1140>

## To the microscopic theory of the superconductive phase in antiferromagnetic metal compounds

M.A. Savchenko<sup>1</sup>, E.M. Savchenko<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*A.M. Prokhorov Academy of Engineering Sciences, 19 Presnensky Val, 123557, Moscow, RF*

<sup>2</sup>*V.N. Karazin Kharkiv National University, 4 Svobody Sq., 61022 Kharkiv, Ukraine*

*olena.m.savchenko@karazin.ua*

ORCID: 0000-0002-5687-1556

DOI: 10.26565/2222-5617-2021-34-02

The theory of the conductivity in antiferromagnetic metal compounds is constructed on the basis of the fluctuational theory of the magnetic superconductors. The superconductor in which there exist localized magnetic moments was considered. It is supposed that magnetic moments are orientated antiferromagnetically in basis plane of the crystal. An estimation for the critical temperature was obtained and necessary and enough conditions of the appearance of high-temperature superconductive phase in rare earth metal compounds were got. The criterion of an appearance of the high-temperature superconductive phase in antiferromagnetic compounds is found.

**Keywords:** high-temperature superconductors, critical temperature, superconductivity in antiferromagnets, fluctuational theory of magnetic superconductors.

## До мікроскопічної теорії надпровідної фази в антиферомагнітних металевих сполуках

М.А.Савченко<sup>1</sup>, О.М. Савченко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Академія інженерних наук ім. А.М. Прохорова Пресненський вал, 19, Москва, 123557, РФ*

<sup>2</sup>*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, м. Свободи 4, 61022, Харків, Україна*

На основі флуктуаційної теорії магнітних надпровідників побудована теорія провідності в антиферомагнітних сполуках металів. Розглянуто надпровідник, в якому існують локалізовані магнітні моменти. Передбачається, що магнітні моменти спрямовані антиферомагнітно в базовій площині кристала. Отримано оцінку критичної температури та отримано необхідні та достатні умови появи високотемпературної надпровідної фази в сполуках рідкісноземельних металів. Знайдено критерій появи високотемпературної надпровідної фази в антиферомагнітних сполуках.

**Ключові слова:** високотемпературні надпровідники, критична температура, надпровідність в антиферомагнетиках, флуктуаційна теорія магнітних надпровідників.

## К микроскопической теории сверхпроводящей фазы в антиферомагнитных металлических соединениях

М.А.Савченко<sup>1</sup>, О.М.Савченко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Академия инженерных наук им. А.М. Прохорова Пресненский вал, 19, Москва, 123557, РФ*

<sup>2</sup>*Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина, м. Свободы 4, 61022, Харьков, Украина*

На основе флуктуационной теории магнитных сверхпроводников построена теория проводимости в антиферомагнитных соединениях металлов. Рассмотрен сверхпроводник, в котором существуют локализованные магнитные моменты. Предполагается, что магнитные моменты антиферомагнитно ориентированы в базисной плоскости кристалла. Получена оценка критической температуры и получены необходимые и достаточные условия возникновения высокотемпературной сверхпроводящей фазы в соединениях редкоземельных металлов. Найден критерий появления высокотемпературной сверхпроводящей фазы в антиферомагнитных соединениях.

**Ключевые слова:** высокотемпературные сверхпроводники, критическая температура, сверхпроводимость в антиферомагнетиках, флуктуационная теория магнитных сверхпроводников.

Recently the microscopic theory of the superconductive antiferromagnetic metal compounds was constructed [1-3]. In the paper [3] we also considered the magnetoresistance

in a paramagnetic state of this compounds. It was shown, that the magnetoresistance depends on the addition to conductivity of the system, which is defined by the

quantum interference of electrons in states with momenta  $p_0(\Psi_1)$  and  $-p_0(\Psi_2)$ . This effect in paramagnetic phase is possible because of the scattering of the conductive electrons on spin density fluctuations of nonlocalized  $s$ -,  $d$ -,  $f$ - electrons and spin fluctuations of localized  $d$ -,  $f$ - electrons, if in the system an appearance a long-range magnetic order is possible. The scattering of electrons on spin fluctuations can lead to a jump of an electron from the state  $p_0(\Psi_1)$  to the state  $-p_0(\Psi_2)$  i.e. the electron trajectory makes a loop. At the entrance we have a momentum  $p_0$  and at the exit we have  $-p_0$ . An electron spin relocates from the state  $\frac{1}{2}$  to the state  $-\frac{1}{2}$ , in the course of time  $\tau_z$  [3]. Thus, the magnetoresistance of a paramagnetic phase depends on the spin-spin relaxation processes of a conductive electrons. If a long-range magnetic order in the system is possible (antiferromagnetic, for example), then there exists the temperature of the magnetic phase transition  $T_N$ . Near the  $T_N$  spin fluctuations anomaly grows and their correlation radius  $\langle r_f \rangle \rightarrow \infty$ ,  $\langle r_f \rangle = \langle r_{f_0} \rangle \tau^{-\nu}$ ,  $\nu \cong \frac{1}{2}$  (see [3]). As we consider the superconductive rare earth metal compounds the point  $T_N$  may prove to be the transition temperature from the paramagnetic state to the superconductive phase, as magnetic fluctuations suppress the Coulomb repulsion of electrons and stimulate the effective electron-phonon interaction. In the superconductive transition point the resistance is equal to zero, i.e. the conductivity  $\sigma \rightarrow \infty$ , but  $\sigma \sim l$ , where  $l$  is the electron mean free path, and  $l = l_0 \tau^{-\nu}$  or  $l = \langle r_f \rangle$  where  $l_0$  is the electron mean free path far from antiferromagnetic transition point, at  $T \gg T_N$ . The resistance in a paramagnetic state depends on the processes of spin-spin relaxation of electrons on fluctuations as well, and it is proportional to

$$R \cong (T - T_N)^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

How shall we consider the superconductor in which there exist localized magnetic moments (antiferromagnetic ordering)? We suppose that magnetic moments are orientated in basis plane of the crystal. From the papers [1–3] it follows that in the superconductive phase there exists a field from the fluctuating subsystem of spins of nonlocalized  $s$ -,  $d$ -,  $f$ - electrons [1–3]. The system of electron spins, distributed randomly in space has  $SO(3)$ -symmetry ( $SO(3) = SU(2)/\mathbb{Z}_2$ ). Orientation of the spin

in a point with coordinates  $x_\nu$  is defined by the axis with direction  $\mathbf{n}$  and turning angle  $\theta^3$  around this axis, i.e. is determined by turning angles  $\theta^\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$  in the spin space. The state of electron with the spin  $s$  is given by two own functions  $\Psi_{\pm s}$ . Now we shall define the wave function of electron in the fluctuating field  $A_\nu$

$$\Psi_{\pm s}(\mathbf{x}/\Gamma) = \frac{1}{N} T \exp\left(\oint_{\Gamma} dx_\nu A_\nu\right) \Psi_{\pm s}(\mathbf{x}) \quad (2)$$

where  $N \geq 2$  (see [1, 2]),  $A_\nu = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} \hat{\tau}^\alpha A_\nu^\alpha$ ,  $\hat{\tau}^\alpha$  are  $SU(N)$  group generators,  $A_\nu$  is the functional of a bent-torsion tensor of the electron spin system and is considered with the Yang-Mills field potential [5]. Now we can write the hamiltonian of a system if there are localized magnetic moments in the system.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_T = N Tr \int_{\mathbf{x} \in \Gamma} d\mathbf{x} \times & \left\{ \frac{1}{N} T \exp\left(\oint_{\Gamma_{x,r}} dx_\nu A_\nu\right) \times \right. \\ & \left. \Psi_\alpha^+(\mathbf{x}) \frac{1}{2\mu_e} p_x^2 \Psi_\alpha(\mathbf{x}) + \right. \\ & \left. + \sum_{k,z} e_{kz} \hat{b}_{kz}^+(\mathbf{x}) \hat{\xi}_{z\alpha}(\mathbf{x}) b_{kz}(\mathbf{x}) + \right. \\ & \left. + \frac{i}{\sqrt{2}} \sum_{k,z} g_{ph}(\mathbf{x}) e_{kz} \eta_{z\alpha}(\mathbf{x}) \left[ \begin{array}{l} \hat{b}_{kz}(\mathbf{x}) - \\ -\hat{b}_{kz}^+(\mathbf{x}) \end{array} \right] \times \right. \\ & \left. \times \Psi_\gamma^+(\mathbf{x}) \Psi_\gamma(\mathbf{x}) + \Psi_\alpha^+(\mathbf{x}) \Delta_{\alpha\gamma}^+(\mathbf{x}) \Psi_\gamma(\mathbf{x}) + \right. \\ & \left. + \Psi_\alpha^+(\mathbf{x}) \Delta_{\alpha\gamma}(\mathbf{x}) \Psi_\gamma^+(\mathbf{x}) + \right. \\ & \left. + Q_J(\mathbf{x}) \langle S^\zeta(\mathbf{x}/\Gamma) \rangle \left( S_{1x}^\zeta + S_{2x}^\zeta \right) \right\} \times \\ & \times \left\{ \frac{1}{N} T \widehat{\exp}\left(\oint_{\Gamma_{x,r}} dx_\nu \widehat{A}_\nu\right) + \left[ \left( \frac{\delta}{\delta S_{\mu\nu}} \right)^2 + \hat{I}(\Gamma) \right] \widehat{B}(\Gamma) \right\} \\ & + N Tr \int_{\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \Gamma} d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \frac{1}{N} T \widehat{\exp}\left(\oint_{\Gamma_{x,r}} dx_\nu \widehat{A}_\nu\right) \left\{ \frac{1}{2} \widehat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{x}) Tr \times \right. \\ & \times \left[ \widehat{\Psi}_\beta^+(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \widehat{\Psi}_\beta(\mathbf{x}') \right] \widehat{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}) + \\ & \left. \frac{1}{2} J(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \Delta \widehat{S}_{1x}^\alpha \Delta \widehat{S}_{2x'}^\alpha + I(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left( \Delta \widehat{S}_{1x}^\beta + \Delta \widehat{S}_{2x'}^\beta \right) \times \right. \\ & \left. \times \widehat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{x}) \sigma_{\alpha\gamma}^\beta \widehat{\Psi}_\gamma(\mathbf{x}) \right\} \frac{1}{N} T \widehat{\exp}\left(\oint_{\Gamma_{x,r}} dx_\nu \widehat{A}_\nu\right) \end{aligned} \quad (3)$$



In the expression (3)  $p_{x_v} = \tau_0 \nabla_{x_v} - [A_1]$ ,  $e_{k\kappa}$  are the unity vectors,  $g_{ph}(\mathbf{x})$  is an electron-lattice potential.  $\hat{b}_{k\kappa}^+$ ,  $\hat{b}_{k\kappa}$  are phonon operators,  $\kappa$  is the parameter of elementary cell,  $\Delta_{\alpha\gamma}(\mathbf{x})$  is a function which defines the superconductive order parameter,  $Q_J(\mathbf{x}) = -\int d\mathbf{x}' J(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ ,  $J(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$  is the exchange potential between localised moments.  $S_{1x}^{\zeta}$ ,  $S_{2x}^{\zeta}$  are spin operators of magnetic sublattices delivering to the quantization axis  $1\zeta$  and  $2\zeta$ , which are orientated in the basis plane along  $y$ -axis ( $x$ -axis is orientated along  $c$ -axis).  $\left\langle S^{\zeta} \left( \frac{\mathbf{x}}{\Gamma} \right) \right\rangle$  is an average sublattice moment,  $\Delta S_{j\kappa}^{\alpha} = S_{j\kappa}^{\alpha} - \left\langle S^{\alpha} \left( \frac{\mathbf{x}}{\Gamma} \right) \right\rangle$ ,  $\alpha = (X, Y, Z)$ .  $I(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$  is an exchange potential between localised spins and spins of nonlocalized  $s$ -,  $d$ -,  $f$ -electrons.  $B(\Gamma) = \frac{1}{N} T \exp \left( \oint_{\Gamma} dx_v A_v \right)$ .  $\delta S_{\mu\nu}$  is an increment of  $\Gamma$  – contour area.

Using the microscopic theory of the superconductive phase in rare earth metal compounds [1, 2] (see also [4]) we can write the condition of the appearance of a superconductive phase in an antiferromagnetic superconductor.

$$\lim \left\langle \lambda_{eph} \left( 2\mathbf{p}_F \left| \Gamma_{\mathbf{x},\tau} \right| \bar{p}_{\perp 0} \right) \right\rangle_{\rho(x, \bar{p}_{\perp 0})} = \ln^{-1} \left[ \frac{2\gamma \langle \omega_D \rangle_{\rho(x)}}{\pi T_N} \right] \cdot \left\langle Tr B(\Gamma_{\mathbf{x},\tau}) \right\rangle \rightarrow 1 \quad (4)$$

$\gamma = e^C$ ,  $C$  is Euler constant.  $\langle \omega_D \rangle_{\rho(x)}$  is an average Debye energy.

$$\left\langle \lambda_{eph} \left( 2\mathbf{p}_F \left| \Gamma_{\mathbf{x},\tau} \right| \bar{p}_{\perp 0} \right) \right\rangle_{\rho(x, \bar{p}_{\perp 0})} = \int_{C_{\infty}^+} d\zeta V_{ph}(\zeta \left| \Gamma_{\mathbf{x},\tau} \right| \bar{p}_{\perp 0}) \left\langle \rho_{\kappa 0}^{ph}(\zeta) \right\rangle_{\rho_{\kappa 0}} - V_C(\Gamma_{\mathbf{x},\tau} / 2\mathbf{p}_F) \quad (5)$$

$$V_{ph}(\zeta \left| \Gamma_{\mathbf{x},\tau} \right| \bar{p}_{\perp 0}) = \frac{3}{2} [\theta(\zeta) + \theta(-\zeta)] \left\langle Tr B(\Gamma_{\mathbf{x},\tau}) \right\rangle \times \left\langle \text{ch}(\pi \ell_{\kappa} \bar{p}_{\perp 0}) \right\rangle_{\rho(x, \bar{p}_{\perp 0})} \int_{\sigma_F} \frac{d\sigma_F}{|\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p})|_{\sigma_F}} g_{ph}^2 \quad (6)$$

$|\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p})|_{\sigma_F}$  is the electron velocity on the Fermi surface.  $\left\langle \text{ch}(\pi \ell_{\kappa} \bar{p}_{\perp 0}) \right\rangle_{\rho(x, \bar{p}_{\perp 0})} = \frac{1}{\pi \ell_{\kappa} \bar{p}_{\perp 0}} \text{sh}(\pi \ell_{\kappa} \bar{p}_{\perp 0})$  is the electron-phonon interaction intensification parameter.  $\left\langle \rho_{\kappa 0}^{ph}(\zeta) \right\rangle_{\rho_{\kappa 0}}$  is an average phonon density of states.

$$V_C \left( \frac{\Gamma_{\mathbf{x},\tau}}{2\mathbf{p}_F} \right) = \left\langle Tr B(\Gamma_{\mathbf{x},\tau}) \right\rangle \times \int_{\sigma_F} \frac{d\sigma_F}{|\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p})|_{\sigma_F}} \left\langle \mathcal{V}_{\kappa 0}(2\mathbf{p}_F) \right\rangle_{\rho_{\kappa 0}} \quad (7)$$

$\left\langle \mathcal{V}_{\kappa 0}(2\mathbf{p}_F) \right\rangle$  is an effective Coulomb repulsion parameter renormalized by longwave fluctuations of a localized spins. The condition (4) is nonsufficient for the appearance the superconductive phase in rare earth metal compounds, as it is in the low-temperature antiferromagnets. In order to write the sufficient condition, we must calculate the correction to the longitudinal sound velocity near the superconductive phase transition point. Corresponding calculations lead us to the following result [6,7].

$$\left| \left\langle \frac{S - S_n}{S_n} \right\rangle_{(\Gamma_v)} \right| = \left| \left( \mathcal{V}(\varepsilon_F) \frac{|\Delta_0(\Gamma_{\mathbf{x},\tau})|^2}{\langle \omega_D \rangle_{\rho(\kappa)}} \times \left( 1 + \ln \left[ \frac{2\gamma \sqrt{\langle \omega_D \rangle_{\rho(\kappa)}^2 - \mu_{\kappa}^2}}{\pi \sqrt{T_N^2 - \mu_{\kappa}^2}} \right] \right) \times \int_{C_{\infty}^+} d\zeta V_{ph}(\zeta \left| \Gamma_{\mathbf{x},\tau} \right| \bar{p}_{\perp 0}) \left\langle \rho_{\kappa}^{ph}(\zeta) \right\rangle_{\rho_{\kappa 0}} \right) \right|_{(\Gamma_v)} \quad (8)$$

$\mathcal{V}(\varepsilon_F)$  is the average density of states on the Fermi surface.  $\left\langle \frac{S - S_n}{S_n} \right\rangle_{(\Gamma_v)}$  is the averaging over space configurations.  $|\Delta_0(\Gamma_{\mathbf{x},\tau})|$  is the superconductive order parameter.

$$\mu_{\chi} = \frac{\rho_f}{2\mu_e} \cdot \frac{\chi^2}{\chi \cdot \chi_{0S} + \chi_{0S}^2 \frac{\rho_f^2}{\rho_F^2}} \quad (9)$$

$$\rho_f = \frac{2\pi}{\langle r_f \rangle},$$

$$\chi_{0S} = \mu_0^2 g^2 \langle \text{Tr} B(\Gamma_{\mathbf{x}, \tau}) \rangle^2 \times \\ \times \langle \text{ch}(\pi \ell_{\chi} \bar{p}_{\perp 0}) \rangle_{\rho(x, \bar{p}_{\perp 0})} \mathcal{V}(\varepsilon_F) f_{\chi}(\varepsilon_F)$$

$\mu_0$  is Bohr magneton,  $g$  is Lande factor,  $\mu_e$  is an electron mass,  $\chi_{0S}$  is the susceptibility of free electrons in the field  $A(x)$  (that is an analog of Pauli susceptibility) (see [3]),  $f_{\chi}(\varepsilon)$  is the Fermi distribution function,  $\chi$  is the paramagnetic susceptibility. Near the transition points  $\mu_{\chi} = \varepsilon_F \frac{\rho_f^2}{\rho_F^2} \cdot \frac{\chi}{\chi_{0S}}$ . Then, from the expression (8) the condition for the temperature of the antiferromagnetic instability follows:

$$T_N > \varepsilon_F \frac{\rho_f^2}{\rho_F^2} \cdot \frac{\chi}{\chi_{0S}} \quad (10)$$

Substituting  $\langle r_f \rangle = \langle r_{f_0} \rangle \tau^{-\nu}$  (see the expressions (9),

(10) in the paper [3]) and  $\frac{\chi}{\chi_{0S}} = \tau^{-2\nu}$ , we have

$$T_N > \left( \frac{a}{\langle r_f \rangle} \right)^2 \varepsilon_F \quad (11)$$

The parameter  $\left( \frac{a}{\langle r_f \rangle} \right)^2$  can be estimated and it is of

order of  $10^{-2}$ . Then, we get an estimation for the  $T_N \rightarrow T_C > 10^2 \text{ K}$ , i.e. conditions (4), (10) are necessary and enough conditions of the appearance of high-temperature superconductive phase in rare earth metal compounds.

The authors thank A.V. Stephanovich for participating in the calculations.

#### References/Literature

1. M.A. Savchenko, A.V. Stephanovich. Solid State Commun, **39**, 725, (1981). [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(81\)90444-0](https://doi.org/10.1016/0038-1098(81)90444-0)

2. L.V. Panina, M.A. Savchenko, A.V. Stephanovich. Physica status solidi (b), **109**, 37, (1982). <https://doi.org/10.1002/pssb.2221090103>

3. M.A. Savchenko, A.V. Stephanovich. Solid State Commun, **44**, 1031, (1982). [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(82\)90328-3](https://doi.org/10.1016/0038-1098(82)90328-3)

4. M.A. Savchenko, A.V. Stephanovich. Sov. JETP Letters. **29**, 661, (1979).

5. C.N. Yang, R.G. Mills. Phys. Rev. **96**, 191, (1954). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.96.191>

6. M.A. Savchenko, A.V. Stefanovich. Fluctuation superconductivity of magnetic systems. (Nauka, Moscow, 1986) 144 p. (M.A. Савченко, А.В. Стефанович. Флуктуационная сверхпроводимость магнитных систем, (Наука, Москва, 1986) 144 с. [In Russian])

7. M.A. Savchenko, E.M. Savchenko, Physical phenomena in solids: Abstracts of the XIV International Scientific Conference, Kharkiv, Ukraine, p. 135, (2019).

PACS: 74.72.Bk

UDC: 538.945

## Photo-induced "high-temperature" superconductivity of multicomponent metal-oxide compounds

Yu.I. Boyko<sup>1</sup>, V.V. Bogdanov<sup>1</sup>, R.V. Vovk<sup>1</sup>, B.V. Grinev<sup>2</sup>

<sup>1</sup>V.N. Karazin Kharkiv National University, Svobody Sq. 4, Kharkiv 61022, Ukraine.

<sup>2</sup>Institute of Scintillation Materials STC "Institute of Single Crystals" National Academy of Sciences of Ukraine, 61072 Kharkov, Nauki Ave., 60, Ukraine  
bogdanov@karazin.ua

ORCID: 0000-0002-9008-6252

DOI: 10.26565/2222-5617-2021-34-03

The work is devoted to the problem of searching for substances with superconductivity at room temperature and atmospheric pressure. It develops ideas in the direction of studying the properties of multicomponent metal-oxide compounds. The main attention is paid to studies devoted to explanation of the role of various mechanisms of the formation of paired electrons in these compounds. Naturally, most of this kind of research is devoted to the study of the chemical structure and crystallographic structure of metal oxides, since they determine the properties of the electronic subsystem of these substances, which cause their transition to the superconducting state.

Analysis of the crystallographic structure of metal oxide  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  leads to the conclusion that the main role in the formation of its superconducting state is played by the presence of planes  $CuO_2$ , separated by solitary planes composed of chains  $CuO$ . The presence of chemically different states of like-named pairs of ions, characterized by different types of bonds (ionic and covalent), as well as the specific layered crystallographic structure of the metal-oxide give rise to the existence of clusters of negative U-centers capable of generating paired electrons realizing the superconductivity of metal-oxide substances.

This paper discusses the possibility of intensifying the transition of metal-oxide compounds to the superconducting state under conditions of irradiation with a photon flux. In this case, the formation of an energy spectrum that allows local pair transitions of electrons can be activated (the effect of internal photoionization) and, thus, the transition of metal oxides to the superconducting state can occur at higher temperatures than is observed under normal conditions.

**Keywords:** metal-oxide compounds, electron-phonon interaction, high-temperature superconductivity.

## Фотоіндукована «високотемпературна» надпровідність полікомпонентних метал-оксидних з'єднань

Ю.І. Бойко<sup>1</sup>, В.В. Богданов<sup>1</sup>, Р.В. Вовк<sup>1</sup>, Б.В. Гриньов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, м. Свободи 4, 61022, Харків, Україна

<sup>2</sup>Інститут сцинтиляційних матеріалів Національної академії наук України, пр-т Науки, 60, Харків 61072, Україна

Робота присвячена проблемі пошуку речовин, що мають надпровідність при кімнатній температурі і атмосферному тиску. У ній розвиваються уявлення в напрямку вивчення властивостей полікомпонентних метал-оксидних сполук. Основна увага приділяється дослідженням, присвяченим з'ясуванню ролі різних механізмів утворення спарених електронів в цих сполуках. Природно, що велика частина такого роду досліджень присвячена вивченню хімічної будови і кристалографічної структури метал-оксидів, оскільки саме вони визначають властивості електронної підсистеми цих речовин, що зумовлюють їхній перехід до надпровідного стану.

Аналіз кристалографічної структури метал-оксиду  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  призводить до висновку про те, що основну роль в процесі формування його надпровідного стану грає наявність площин  $CuO_2$ , розділених відокремленими площинами, що складаються з ланцюжків  $CuO$ . Наявність хімічно різних станів однойменних пар іонів, що характеризуються різним типом зв'язку (іонним і ковалентним), а також специфічна шарувата кристалографічна структура метал-оксиду обумовлюють існування скупчень негативних U-центрів, здатних генерувати спарені електрони, що реалізують надпровідність метал-оксидних речовин.

У даній роботі обговорюється можливість інтенсифікації переходу метал-оксидних сполук до надпровідного стану в умовах опромінювання їх потоком фотонів. В цьому випадку процес формування енергетичного спектра, що допускає локальні парні переходи електронів, може бути активований (ефект внутрішньої фотоіонізації) і, таким чином, перехід метал-оксидів до надпровідного стану може здійснюватися при більш високих температурах, ніж це спостерігається за звичайних умов.

**Ключові слова:** метал-оксидні сполуки, фононна взаємодія, високотемпературна надпровідність.

## Фотоиндуцированная «высокотемпературная» сверхпроводимость поликомпонентных металл-оксидных соединений

Ю.И. Бойко<sup>1</sup>, В.В. Богданов<sup>1</sup>, Р.В. Вовк<sup>1</sup>, Б.В. Гринев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Харьковский национальный университет им. Каразина, пл. Свободы, 4, Харьков 61022, Украина

<sup>2</sup>Институт сцинтилляционных материалов НТЦ «Институт монокристаллов» НАН Украины, 61072 Харьков, пр. Науки, 60, Украина

Работа посвящена проблеме поиска веществ, обладающих сверхпроводимостью при комнатной температуре и атмосферном давлении. В ней развиваются представления в направлении изучения свойств поликомпонентных металл-оксидных соединений. Основное внимание уделяется исследованиям, посвященным выяснению роли различных механизмов образования спаренных электронов в этих соединениях. Естественно, что большая часть такого рода исследований посвящена изучению химического строения и кристаллографической структуры металл-оксидов, поскольку именно они определяют свойства электронной подсистемы этих веществ, обуславливающие переход их в сверхпроводящее состояние.

Анализ кристаллографической структуры металл-оксида  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  приводит к выводу о том, что основную роль в процессе формирования его сверхпроводящего состояния играет наличие плоскостей  $\text{CuO}_2$ , разделенных уединенными плоскостями, состоящими из цепочек  $\text{CuO}$ . Наличие химически различных состояний одноименных пар ионов, характеризующихся разным типом связи (ионным и ковалентным), а также специфическая слоистая кристаллографическая структура металл-оксида обуславливают существование скоплений отрицательных U-центров, способных генерировать спаренные электроны, реализующие сверхпроводимость металл-оксидных веществ.

В данной работе обсуждается возможность интенсификации перехода металл-оксидных соединений в сверхпроводящее состояние в условиях облучения их потоком фотонов. В этом случае процесс формирования энергетического спектра, допускающего локальные парные переходы электронов, может быть активирован (эффект внутренней фотоионизации) и, таким образом, переход металл-оксидов в сверхпроводящее состояние может осуществляться при более высоких температурах, чем это наблюдается в обычных условиях.

**Ключевые слова:** металл-оксидные соединения, электрон-фононное взаимодействие, высокотемпературная сверхпроводимость.

### 1. Introduction

The discovery in 1986–1987 of "high-temperature" superconductivity (zero electrical resistance) of multicomponent metal-oxide compounds, aroused great interest in the study of the properties of this class of substances [1, 2]. These include a number of compounds described by the general chemical formula  $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ , where  $\text{R} = \text{Y}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Ho}, \text{La}, \text{Pr}$  and etc. Of the indicated series of metal oxides, the compound  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  is most deeply and comprehensively studied. It is characterized by the transition temperature to the superconducting state  $T_c \approx 90\text{K}$ , which is an order of magnitude higher than the average transition temperature observed in the classical metal superconductors. It is this circumstance that was the reason that this group of substances was called "high-temperature" superconductors (HTSC). In addition to the above compounds, metal-oxide superconductors also include more complex compounds  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10-x}$ ,  $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10-x}$  and  $\text{Hg}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10-x}$ , which have the highest transition temperature values among this class of substances:  $T_c = 110, 125$  and  $164\text{K}$  respectively. In further research, undertaken after the discovery of "high-temperature" superconductivity, the main efforts were directed to the discovery of new superconducting substances. At the same time, the strategic goal of all research was the discovery of substances with superconductivity at room temperature ( $\approx 300\text{K}$ ) and atmospheric pressure. The requirement that this condition be satisfied is extremely important for the implementation of a wide and, most importantly,

economically profitable use of superconductors in practice. However, to date, the specified strategic goal of numerous studies on superconductivity remains unattained. One of the main reasons for this is the lack of clarity and unambiguity in understanding the microscopic mechanism of superconductivity of metal-oxide compounds. An attempt to explain the superconductivity of these substances using the BCS theory [3] (phonon pairing of electrons), which describes the "low-temperature" superconductivity of metals and metal alloys, turned out to be unacceptable [4]. In this case, however, a detailed study of the nature of elementary charge carriers in metal oxides showed that the electrical conductivity in them at temperatures  $T \leq T_c$  is realized due to the transport of paired electrons (bosons), as in the case of "low-temperature" metal superconductors.

Currently, studies of the effect of superconductivity are carried out in two main directions. The first of them is the study of superconductivity of metal compounds with hydrogen (hydrides). These compounds, due to the low mass of hydrogen atoms, have an increased fraction of high-frequency phonons (optical mode). In accordance with the BCS theory, it is precisely this kind of compounds that should have the maximum electron - phonon interaction and, accordingly, be characterized by high temperatures  $T_c$  [5-7]. For example, it was found that the compound  $\text{LaH}_{10}$  turns into a superconductor at a temperature  $\approx 250\text{K}$ , which is very close to the desired temperature  $\approx 300\text{K}$ . However, this result did not fully solve the main problem formulated above, since

superconductivity in hydrides and their stable phase state are observed only under very high pressure  $\approx (150 \div 200$  GPa). The creation of such a pressure level is a laborious and economically expensive technological task, which makes it practically impossible to use superconducting hydrides in practice.

Another modern direction of research on superconductivity is the continuation of study of the of multicomponent metal-oxide compounds properties. First of all, these are studies devoted to ascertain the role of various mechanisms of the paired electrons formation in these compounds. Naturally, most of this kind of research is devoted to the chemical and crystallographic structure study of metal oxides, since they determine the properties of the electronic subsystem of these substances.

This paper discusses the possibility of intensifying the transition of metal-oxide compounds to the superconducting state under conditions of irradiation with a photon flux. In this case, the formation of an energy spectrum that allows local pair transitions of electrons can be activated (the effect of internal photoionization) and, thus, the transition of metal oxides to the superconducting state can occur at higher temperatures than is observed under normal conditions.

## **2. Typical general properties of metal oxides and specific features of the electronic and phonon spectrum in this class of substances**

1) First of all, it should be noted that all of the above-listed superconducting metal-oxide compounds contain a copper ion, as well as ions of some other metals, which have the ability to change their valence: ( $\text{Cu}^{1+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{3+}$ ), ( $\text{Bi}^{3+}$ ,  $\text{Bi}^{5+}$ ). Accordingly, the presence of these ions makes it easy to change the oxidation state of this kind of oxides [8]. At the same time, there is a clear correlation between the value of the critical temperature  $T_c$  of these substances transition to the superconducting state and the concentration of oxygen ions [9 – 11].

2) The transition to the superconducting state of metal-oxide compounds occurs at relatively low values of the energy states of electrons density at the Fermi level:  $N(E_F) \approx (10^{26} \div 10^{27})$   $1/\text{m}^3$ . At the same time, the conduction bands of these substances are quite wide and are characterized by an interval of values  $\approx (3 \div 10)$  eV.

3) All metal oxides have a specific phonon spectrum, characterized by the presence of a certain fraction of high-frequency phonons (optical mode) [12, 13].

4) All superconducting metal-oxide compounds are characterized by a temperature  $T^* \geq T_c$ , upon reaching which a deviation from the "normal" conductivity begins (the opening temperature of the so-called "pseudo-gap" in the energy spectrum of electrons) [14, 15]. In this case, the value of the temperature  $T^*$  depends on the value of the

parameter  $x$  (stoichiometry parameter). So, for example, in the connection  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  at a value of  $x \approx 0.4$ , the temperature  $T^*$  reaches the value  $\approx 450$  K, then, with decreasing  $x$ , it gradually decreases and at  $x=0$  coincides with the critical temperature  $T^* \approx T_c \approx 90$  K [15].

5) In the transition to the superconducting state at  $T \leq T_c$  all metal oxides are characterized by the appearance in the energy spectrum of the electronic subsystem of a relatively narrow ( $\approx 5 \cdot 10^{-3} \div 10^{-2}$  eV) energy gap near the Fermi level.

6) From the chemistry point of view, metal oxides are complex isodesmic substances with an ionic-covalent type of bond [16]. Specifically, in these compounds, the oxygen ion O (anion) forms chemical bonds with several different metal ions (cations). In this case, for the formation of a stable (thermodynamically equilibrium) structure of these compounds, it is necessary to fulfill the condition of electrical neutrality of the unit crystal cell. That is why some of the ions change their valence, and some ions may even be partially absent (for example, oxygen), violating the stoichiometry of the substance, while maintaining, however, the electroneutrality of the substance as a whole.

7) The features of the chemical composition of metal-oxide compounds indicated in items 1 and 6 lead to the fact that at the value of the parameter  $x \approx 0$  in these substances a specific crystallographic structure of atoms is formed, described by an orthorhombic unit cell. A distinctive feature of this structure is that it is layered and contains two configurations of the oxygen environment of copper ions: a tetrahedral pyramid in the  $\text{CuO}_2$  planes and a rhombus consisting of CuO chains in the basal plane (ab). Thus, a structure is formed, which consists of so-called "perovskite-like" blocks containing  $\text{CuO}_2$  planes separated by solitary planes from CuO chains. It is this structure that is characteristic of superconducting metal oxides. With a large deficit of oxygen ions ( $x > 0.5$ ), a different (tetragonal) crystal structure is realized, and superconductivity in this case disappears [17].

Thus, based on the above information on the general characteristic properties of metal-oxide superconducting compounds, we can draw the following conclusion. The main factors determining the formation of specific phonon and electronic spectra of metal-oxide compounds and, accordingly, causing their transition to the superconducting state, are the stoichiometric composition, as well as the crystallographic structure of these substances.

## **3. Possible mechanisms for the formation of localized electron pairs, the movement of which realizes the superconductivity of metal-oxide compounds**

As mentioned above, in metal oxides, in addition to the electron - phonon mechanism of superconductivity, associated with the mutual attraction of electrons due to the

exchange of phonons, other mechanisms of the formation of electron pairs can also be realized. First of all, these can be mechanisms associated with the so-called exchange-correlation interaction of electrons. In this regard, many models have been discussed in attempts to explain the possible participation of various electronic excitations in the formation of paired charge carriers in HTSC: plasmons, excitons, spin fluctuations, etc [18, 19]. With all this, the contribution of the electron - phonon interaction during the formation of a superconducting state in these compounds is also not denied by anyone. In this regard, it is of interest to estimate the electron-phonon pairing constant  $\lambda$ , which appears in the standard formula of the BCS theory for  $T_c$

$$T_c \approx \theta \cdot \exp [ - (1+\lambda) / (\lambda - \mu) ]. \quad (1)$$

Here  $\theta$  is the Debye temperature,  $\mu$  is the Coulomb pseudo-potential characterizing the repulsion of electrons (usually  $\mu \approx 0,1 \div 0,15$ ). According to calculations performed in [20], in the phonon spectrum of metal oxides, there is a high-frequency mode associated with the possibility of displacement of oxygen ions located in the planes formed by CuO molecules. In this case, two oxygen ions located on opposite sides of the copper ion can move upward from the plane, and the other two can move downward. Calculation of the pairing constant value taking into account the role of the oxygen ions displacements, as well as the characteristic value  $\theta \approx 300\text{K}$ , showed that  $\lambda \approx 0,2$ . In accordance with relation (1), such a value of the pairing constant should determine the value  $T_c \approx 10\text{K}$ . This estimate indicates that the electron - phonon mechanism of electron pairing makes an appreciable, but not determinant contribution to the formation of the superconducting state in metal oxides. In this regard, the following conclusion can be drawn: until now, researchers have succeeded in quite deep progress in studying the properties of metal-oxide HTSCs. However, there are still many questions related to the explanation of their behavior, both in the "normal" and in the superconducting state. Until now, there is no unambiguous understanding of the nature and role of another, different from the electron-phonon, mechanism causing the appearance of electron pairs. Among the unresolved issues, it is also necessary to note the lack of understanding of the reasons leading to the appearance of a "pseudo-gap" in metal-oxide superconductors at a temperature  $T^*$  significantly exceeding the temperature of the superconducting transition  $T_c$ . The dependence of the  $T^*$  value on the doping degree of metal oxides with oxygen ions remains unexplained. The most acceptable is the physical concept, which explains almost all the features of the properties of metal-oxide HTSC compounds, proposed in the works [14, 21]. It is based on the idea of the existence in metal oxides

of special structural clusters of atoms, consisting of the so-called negative U-centers. In accordance with the chemical composition and crystallographic structure of metal oxides, the authors of the above works drew attention to the fact of the formation in these compounds of a special group of ions, consisting of two positive copper ions (cations) embedded in the CuO<sub>2</sub> plane and the surrounding negative oxygen ions ( anions) (see Fig. 1).

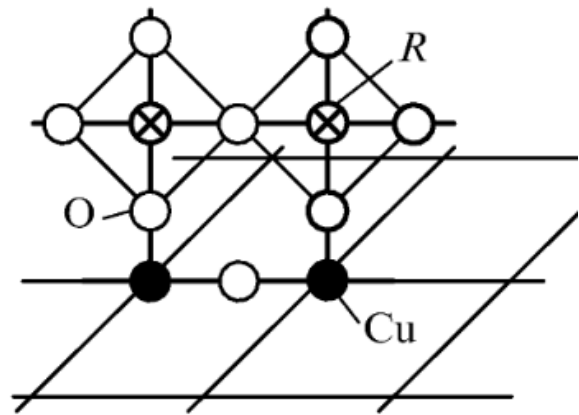


Fig. 1. Fragment of YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-x</sub> crystal structure containing a Cu<sub>2</sub>R<sub>2</sub>O<sub>n</sub> cluster, where Cu ions are "embedded" into the CuO<sub>2</sub> plane, and the R = Cu ions in the CuO<sub>3</sub> chains.

Such a structural element acquired the name "negative U-center", and its presence in metal-oxide compounds was confirmed experimentally. A detailed analysis of the forming energy spectrum of the electronic subsystem showed that the combination of a certain number of U centers (cluster formation) causes the appearance in the energy spectrum of levels that allow a local pair transition of electrons from an oxygen ion to two neighboring copper ions (Fig. 2).

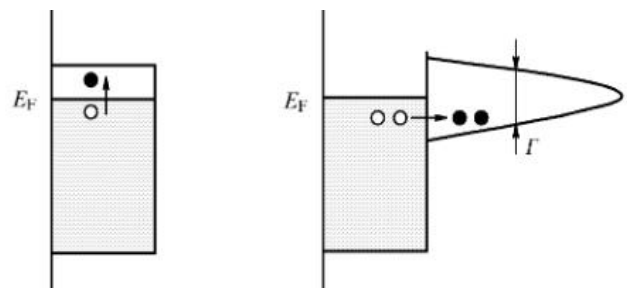


Fig. 2. Diagram of the band structure of the electronic energy spectrum: a) ordinary metal; b) metal-oxide compound [15]. Holes appear in the filled zone due to the transition of electron pairs to a pair level, the width of which  $\Gamma \sim T$ .

Wherein at the initial stage of the energy spectrum formation, the appearance of a small number of U-centers causes a slight "excess" electrical conductivity at the

temperature  $T^*$  (the opening temperature of the so-called pseudo-gap). The minimum cluster size, which makes the pair transition of electrons possible, is determined by the coherence length in the  $\text{CuO}_2$  plane and is  $\approx 10^{-9}$  m. As the concentration of oxygen ions in the metal oxide increases, ie, at  $x \rightarrow 0$ , the total length of the clusters containing U-centers increases, and the temperature  $T^*$  gradually decreases, approaching the temperature  $T_c$ . Thus, the critical temperature of the transition to the superconducting state is reached when the anionic sublattice of the metal-oxide compound is completely filled with oxygen ions and, accordingly, when the maximum concentration of negative U-centers is reached. It is important to pay attention to the following fact. As already mentioned, the compounds  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10-x}$ ,  $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10-x}$  and  $\text{Hg}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10-x}$  also belong to metal oxide superconductors. Moreover, they have the highest values of the critical temperature  $T_c$ . Following the above outlined logic, this can be explained by the fact that the structure of these compounds contains an additional number of  $\text{CuO}_2$  planes, the presence of which leads to the formation of an increased number of U-centers in comparison with other metal-oxides. Accordingly, these compounds are characterized by higher values  $T_c$ . An interesting fact that evidence of reality of the above scheme is the result of the work [22], in which the process of increasing the total length of clusters from U-centers and, accordingly, the transition of the metal oxide to the superconducting state, was significantly activated by the action of external pressure.

Thus, we can conclude that the main role in the formation of the superconducting state in metal-oxide compounds is played by the presence of  $\text{CuO}_2$  planes separated by solitary planes consisting of  $\text{CuO}$  chains. The presence of chemically different states of like-named pairs of ions, characterized by different types of bonds (ionic and covalent), as well as the specific layered crystallographic structure of metal-oxides determine the existence of negative U-centers clusters, capable of generating paired electrons, realizing the superconductivity of metal-oxide substances.

#### **4. Possible increase in the transition temperature of metal oxides from the "normal" to the superconducting state under conditions of irradiation with photons**

In accordance with the conclusion made in the previous paragraph concerning the nature of the mechanism of metal-oxide compounds transition to the superconducting state, it can be assumed that this transformation can occur at higher temperatures if these substances are irradiated with a flux of photons. Indeed, formation of the energy spectrum of negative U-centers clusters is associated with

the formation of ionic-covalent bonds between planes consisting of  $\text{CuO}_2$  molecules and planes formed from  $\text{CuO}$  chains. This process can be intensified without disturbing the crystallographic structure of the compound under conditions of irradiation of metal oxides with a photon flux [23]. As already indicated, under normal conditions (without irradiation), the first signs of U-centers formation appear at the temperature  $T^*$ , which significantly exceeds the critical temperature  $T_c$ . In this regard, it is natural to assume that under conditions of photon irradiation, the formation of the maximum possible number of U-centers can be significantly accelerated. In this case, the thermal destruction of electron pairs will be compensated by the process of the creation of new pairs. Accordingly, the temperature  $T_c$  should approach the temperature  $T^*$ . Let us make quantitative estimates of some parameters of the photon flux, under the influence of which the described effect can be realized. First of all, it is obvious that the photon energy must satisfy the relation:

$$h \cdot \nu \approx W. \quad (2)$$

Here  $h$  is Planck's constant,  $W$  is the energy of the photoinduced chemical reaction causing the formation of a negative U-center,  $\nu$  is the frequency ( $\nu = c/L$ , where  $c$  – the light speed,  $L$  – radiation wavelength). In the particular case under consideration,  $W$  is the energy required for the transfer of electrons from copper ions to oxygen ions. Obviously, quantitatively, the minimum value of  $W$  is equal to the thermal energy sufficient for the destruction of electron pairs in the discussed compounds:  $W \approx kT_c$  ( $k$  – Boltzmann constant). Since for metal oxides  $T_c \approx (10 \div 100)\text{K}$ , then  $W \approx (10^{-3} \div 10^{-2})\text{eV}$ . Thus, it follows from relation (2) that  $L \approx (10^{-5} \div 10^{-4})\text{m}$ . Such a wavelength interval corresponds to infrared light radiation, sufficiently powerful fluxes of which can be easily achieved using laser technology [24]. To implement the described effect, the required photon flux density should approximately correspond to the atomic density of the irradiated substance:  $n_{\text{phot}} \approx n_{\text{at}} \approx 10^{29} 1/\text{m}^3$ . Such a photon flux density can be achieved using a laser with a power  $\approx 10^{11} \text{W}/\text{m}^2$  and pulse duration  $\approx 10^{-8} \text{s}$  [24]. It is important to take into account that infrared radiation penetrates into the volume of metal-oxide compounds to a depth  $\approx 10^{-6} \text{m}$  [25]. Consequently, the described effect can be realized either in the near-surface layer of the irradiated sample, or in the volume of a film of the specified thickness. In addition, it is obvious that the described effect should show itself in full when using single-crystal samples, since grain boundaries in polycrystals, usually characterized by the size  $\approx (10^{-5} \div 10^{-4})\text{m}$ , are effective infrared scattering centers.

### 5. Conclusions

1) Under conditions of laser irradiation with a wavelength  $L \leq 10^{-4}\text{m}$  and pulse duration  $\approx 10^{-8}\text{s}$  when the power density is reached  $\approx 10^{11}\text{W/m}^2$  In the energy spectrum of the electronic subsystem of metal-oxide HTSC compounds, a photoinduced chemical reaction can occur, accompanied by the transfer of electrons from copper atoms Cu to oxygen atoms O.

2) As a result of a photoinduced chemical reaction in metal oxides, special structural elements are formed – negative U-centers, the clusters of which are characterized by a specific energy spectrum that allows local pair transitions of electrons.

3) The appearance of pairs of electrons (bosons) in the discussed metal-oxide compounds can cause their electrical superconductivity. In this case, the critical temperature of these compounds transition to the superconducting state  $T_c$  under irradiation with a photons flux can increase and reach the value of the "pseudo-gap" opening temperature  $T^*$  (Fig. 3).

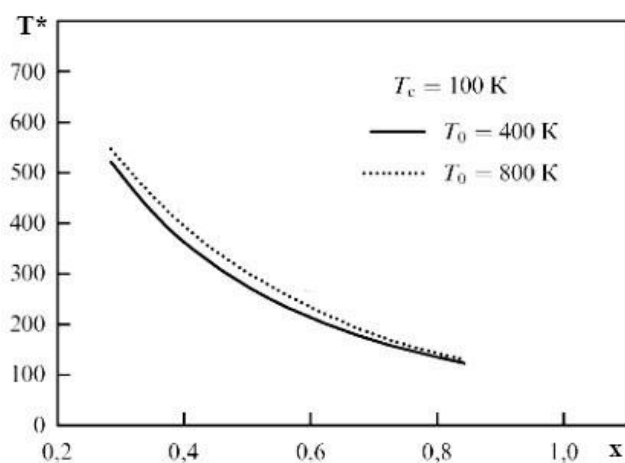


Fig. 3. Dependence of the "pseudo-gap" opening temperature  $T^*$  in the compound  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  on parameter  $x$  [15].

4) The described effect can be realized in near-surface layers with a thickness  $\approx 10^{-6}\text{m}$  in bulk single-crystal samples or in thin films of the same thickness.

### References

1. J.G. Bednorz, K.A. Mueller, Z. Phys., B **64**, 189, (1986). <https://doi.org/10.1007/BF01303701>
2. M.K. Wu, et al., Phys. Rev. Lett., **58**, 908, (1987).
3. J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, Phys. Rev., **108**, 1175, (1957). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175>
4. B. Batlog, et al., Phys. Rev. Lett., **58**, 2333, (1987).
5. Y. Li, J. Hao, Y. Ma, J. Chem. Phys., **140**, 174, (2014).
6. A.P. Drozdov, et al., Nature, **525**, 73, (2015). <https://doi.org/10.1038/nature14964>
7. M. Somayzulu, et al., Phys. Rev. Lett., **122**, 027001, (2019). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.027001>
8. Yu.I. Boyko, V.V. Bogdanov, R.V. Vovk, Journal of V.N. Karazin Kharkiv National University, series "Physics", **32**, 10-13, (2020). <https://doi.org/10.26565/2222-5617-2020-32-01>
9. P. Strobel, J.J. Capponi, M. Marezio, Solid State Commun., **64**, 513, (1987). [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(87\)90770-8](https://doi.org/10.1016/0038-1098(87)90770-8)
10. K. Yvon, M. Francois, Z. Phys., **76**, 413, (1989). <https://doi.org/10.1007/BF01307892>
11. M. Weller et al., Phys C, **162**, 953, (1989). [https://doi.org/10.1016/0921-4534\(89\)90539-X](https://doi.org/10.1016/0921-4534(89)90539-X)
12. R. Matsunaga et al., Phys. Rev. Lett., **111**, 057002, (2013). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.057002>
13. R. Matsunaga et al., Science, **345**, 1145, (2014). <https://doi.org/10.1126/science.1254697>
14. E.G. Maximov, Uspehi Fizicheskikh Nauk, **170** (10), 1033, (2000). (E.G. Максимов, Успехи физических наук, **170** (10), 1033, (2000)). [in russian] <https://doi.org/10.3367/UFNr.0170.200010a.1033>
15. K.V. Micen, O.M. Ivanenko, UPHN, **1744** (5), 545, (2004). (К.В. Мицен, О.М. Иваненко, УФН, **1744** (5), 545, (2004)) [in russian]
16. R. Evans, Vvedenie v kristallogimiyu, (Goskhimizdat, Moscow, 1948), 367 p. (Р. Эванс, Введение в кристаллохимию, (Госхимиздат, Москва, 1948), 367 с.) [in russian]
17. H. Jaeger, S. Hofman, G. Kaiser, G. Petzow, Phys. C, **153**, 133, (1988). [https://doi.org/10.1016/0921-4534\(88\)90517-5](https://doi.org/10.1016/0921-4534(88)90517-5)
18. V.L. Ginzburg, E.G. Maksimov, Phys. C, **235-240**, 193, (1994). [https://doi.org/10.1016/0921-4534\(94\)91346-3](https://doi.org/10.1016/0921-4534(94)91346-3)
19. M.L. Cohen, S.A. Wolf, V.Z. Kresin, Novel Superconductivity, (Pl. Press, London, 1987), 1095 p.
20. X. Yang, et al., Nat. Photon, **13**, 707, (2019).
21. K.V. Micen, O.M. Ivanenko, ЖЭТФ, **118**, 666, (2000). (К.В. Мицен, О. Иваненко, ЖЭТФ, **118**, 666, (2000).) [in russian]
22. Yu.I. Boyko, et al., Low. Temp. Physics, **44**, 63, (2018).
23. D. Fausti, et al., Science, **331**, 189, (2011). <https://doi.org/10.1126/science.1197294>
24. L.I. Mirkin, Fizicheskie osnovy obrabotki materialov luchami lazera, (Moscow, 1975), 304 p. (Л.И. Миркин, Физические основы обработки материалов лучами лазера, (Москва, 1975), 304 с.) [in russian]
25. P.A. Leont'ev, M.G. Han, N.T. Chekalova, Lazernaya poverhnostnaya obrabotka metallov i splavov, (Metallurgiya, Moscow, 1986), 142 p. (П.А. Леонтьев, М.Г. Хан, Н.Т. Чекалова, Лазерная поверхностная обработка металлов и сплавов, (Металлургия, Москва, 1986), 142 с.) [in russian]



PACS: 61.82.Bg, 62.20.F-, 61.72.Lk

UDC: 539.379.4

## Rotation of crystal lattice induced by the development of dislocation slip in flat two-dimensional polycrystalline samples of aluminum with a “pancake” grain structure

Ye.V. Ftomov

*<sup>1</sup>V.N. Karazin Kharkiv National University, Svobody Sq. 4, Kharkiv 61022, Ukraine.  
yevhenii.ftomov@gmail.com*

ORCID: 0000-0001-8856-9629

DOI:10.26565/2222-5617-2021-34-04

In this paper presented the results of the rotation of the crystal lattice of grains in flat samples of two-dimensional polycrystals of aluminum with a “pancake” grain structure with an average grain size  $d = 5 \div 15$  mm and initial dimensions of the working section 100 mm (length), 20 mm (width), 0.15 mm (thickness). Rotation of the grain crystal lattice occurs as a result of dislocation sliding during deformation of the samples by tension under active loading at a constant strain rate  $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{c}^{-1}$  at room temperature. The features of such samples are following: there is only one layer of grains in the cross section and their sizes in the directions of the length and width of the sample significantly exceed the thickness of the sample; there is no constraint of the grain structure along the thickness of the sample. As a result, there is no constraint of plastic deformation in this direction. Experiment shows that slip deformation occurs predominantly in one slip system.

According to the well-known theoretical concepts of rotational plasticity, a model is proposed for the rotations of the crystal lattice of grains, which are caused by the action of one slip system. Calculations show that the trajectory of rotation of the tension axis on the plane of the stereographic projection is a circular arc, which is defined by the initial position of the tension axis. The equation for such a circle is obtained. Two cases of mutual arrangement of the tension axis, the normal to the sliding plane and the sliding direction are possible. If the initial crystallographic orientation of the grain is such that the tension axis lies in the plane of the sliding direction and normal to the sliding plane, then tensile axis during the lattice rotation will be moving towards the sliding direction until it coincides with it. In this case, the tensile axis rotation traces cross point [101] as for a single crystal sample. In other case, when the directions of the tensile axis, sliding and normal to the sliding plane are not coplanar, then rotation trace does not pass through the point [101], but follows circular arc as mentioned earlier.

Comparison of the experimental data of the tensile axis rotation traces (based on the results of X-ray studies) with the calculated traces proposed by model (with one active slip system) shows their good agreement.

**Keywords:** flat two-dimensional aluminum polycrystals, active tensile plastic deformation, dislocation slip, grain crystal lattice rotation

## Поворот кристалічної решітки внаслідок розвитку дислокаційного ковзання в плоских двовимірних полікристалічних зразках алюмінію з “млинцевою” зеренною структурою

Є.В. ФТЪОМОВ

*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, м. Свободи 4, 61022, Харків, Україна*

Наведено результати досліджень переорієнтації кристалічної решітки зерен у плоских зразках двовимірних полікристалів алюмінію з “млинцевою” зеренною структурою із середнім розміром зерен  $d = 5 \div 15$  мм і початковими розмірами робочої частини 100 мм (довжина), 20 мм (ширина), 0.15 мм (товщина). Переорієнтація решітки зерен виникає внаслідок дислокаційного ковзання в процесі деформування зразків розтягуванням в умовах активного навантаження з постійною швидкістю деформації  $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{c}^{-1}$  при кімнатній температурі. Специфікою таких зразків, у яких в поперечному перерізі є тільки один шар зерен і розміри зерен у напрямках довжини й ширини зразка істотно перевищують товщину зразка, є відсутність обмеженості зеренної структури по товщині зразка. Внаслідок цього відсутня утрудненість пластичної деформації в цьому напрямку. Згідно з експериментом деформація ковзанням здійснюється переважно в одній системі ковзання.

У межах відомих теоретичних уявлень про ротаційну пластичність запропоновано модель поворотів кристалічної решітки зерен, які спричиняє дія однієї системи ковзання. На підставі розрахунків показано, що траєкторією переорієнтації осі розтягування на площині стереографічної проекції є дуга кола, початкова точка якої відповідає початковій кристалографічній орієнтації зерна. Одержано рівняння такого кола. При цьому є можливими два випадки взаємного розташування осі розтягування, нормалі до площини ковзання й напрямку ковзання. Якщо вихідна кристалографічна орієнтація зерна є такою, що вісь розтягування розташована в площині напрямку ковзання й нормалі до площини ковзання, то поворот решітки зерна відбуватиметься так, що вісь розтягування наблизитиметься до напрямку ковзання до збігу з ним.

У цьому випадку продовження траєкторії переорієнтації осі розтягування в спряженому стереографічному трикутнику потрапляє в точку [101] так само, як це відбувається для монокристалічного зразка. В іншому випадку, коли напрямки осі розтягування, ковзання й нормалі до площини ковзання є некомпланарними, продовження траєкторії переорієнтації в спряженому стереографічному трикутнику не потрапляє в точку [101], але прямує за згаданою вище дугою кола.

Порівняння експериментальних даних визначення траєкторії переорієнтації осі розтягування за результатами рентгенографічних досліджень із даними розрахунку на основі запропонованої моделі траєкторії переорієнтації осі розтягування внаслідок дії однієї системи ковзання свідчить про їхню добру узгодженість.

**Ключові слова:** плоскі двовимірні полікристали алюмінію, активна пластична деформація розтягуванням, дислокаційне ковзання, повороти кристалічної решітки зерен.

## Разворот кристаллической решетки вследствие развития дислокационного скольжения в плоских двумерных поликристаллических образцах алюминия с “блинной” зеренной структурой

Е.В. Фтёмов

*Харьковский национальный университет им. Каразина, пл. Свободы, 4, Харьков 61022, Украина*

Представлены результаты исследований переориентации кристаллической решетки зерен в плоских образцах двумерных поликристаллов алюминия с “блинной” зеренной структурой со средним размером зерен  $d = 5 \div 15$  мкм и исходными размерами рабочей части 100 мм (длина), 20 мм (ширина), 0.15 мм (толщина). Разворот решетки зерен возникает в результате дислокационного скольжения в процессе деформирования образцов растяжением в условиях активного нагружения с постоянной скоростью деформации  $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{с}^{-1}$  при комнатной температуре. Спецификой таких образцов, у которых в поперечном сечении имеется только один слой зерен и размеры зерен в направлениях длины и ширины образца существенно превышают толщину образца, является отсутствие стесненности зеренной структуры по толщине образца. Вследствие этого отсутствует стесненность пластической деформации в этом направлении. Как показывает эксперимент, деформация скольжением осуществляется преимущественно в одной системе скольжения.

В рамках известных теоретических представлений о ротационной пластичности предложена модель поворотов кристаллической решетки зерен, которые вызывает действие одной системы скольжения. На основе расчетов показано, что траекторией переориентации осей растяжения на плоскости стереографической проекции является дуга окружности, начальная точка которой соответствует исходной кристаллографической ориентации зерна. Получено уравнение такой окружности. При этом возможны два случая взаимного расположения осей растяжения, нормалей к плоскости скольжения и направления скольжения. Если исходная кристаллографическая ориентация зерна такова, что ось растяжения лежит в плоскости направления скольжения и нормали к плоскости скольжения, то поворот решетки зерна будет происходить так, что ось растяжения приближается к направлению скольжения до совпадения с ним. В этом случае продолжение траектории вращения осей растяжения в сопряженном стереографическом треугольнике проходит через точку [101] так же, как это происходит для монокристаллического образца. В другом случае, когда направления осей растяжения, скольжения и нормали к плоскости скольжения не компланарны, продолжение траектории переориентации в сопряженном стереографическом треугольнике не проходит через точку [101], но идет по упомянутой выше дуге окружности.

Сравнение экспериментальных данных определения траектории поворота осей растяжения по результатам рентгенографических исследований с данными расчета на основе предложенной модели траектории поворота осей растяжения вследствие действия одной системы скольжения свидетельствует об их хорошем соответствии.

**Ключевые слова:** плоские двумерные поликристаллы алюминия, активная пластическая деформация растяжением, дислокационное скольжение, повороты кристаллической решетки зерен.

### 1. Introduction

Plastic deformation of macroscopic single crystals and polycrystals of metals has been studied in detail for a long time [1, 2]. Recently, attention has been focused on the analysis of strain hardening of micro- and nanocrystalline samples, including those with a transverse size in the micro- and nanoscale, as a promising materials for miniaturization of devices in the medical industry, microelectronic industry and nanotechnology, etc. [3 – 6]. At the same time, in practice, thin films, foils and plates are widely used, which have one to several layers of grains are located in the thickness of a polycrystalline material.

In this regard, it is important to study the mechanical properties of flat two-dimensional polycrystalline samples with the so-called “pancake” grain structure or close to it,

when there is only one layer of grains in the cross section of the sample, and the grain sizes in the directions of the length and width of the sample significantly exceed the thickness of the sample [3, 6 – 10].

For coarse-grained flat two-dimensional polycrystalline samples with a “pancake” grain structure, one of the important factors determining their mechanical behavior is the crystallographic orientation of the grains. During the process of plastic deformation, the shape and size of the grains, as well as their crystallographic orientation are changing [10 – 17]. This work is devoted to the study of grain crystal lattice orientation changes of aluminum samples due to the development of dislocation slip under conditions of uniaxial tensile deformation.

## 2. Experimental procedure

### 2.1. Specimen preparation

To analyze the lattice rotations during plastic deformation, large grained specimens of pure aluminum (99.96 %) were used. Samples were taken from rolled polycrystalline aluminum foil 0.15 mm thick. Samples with dimensions 100 mm long, 20 mm wide, and 0.15 mm thick were cut from foil in the rolling direction. In order to relieve internal stresses caused by foil rolling, the samples were annealed for 2 hours at  $T = 400$  °C. Then samples were deformed by uniaxial tension to  $\varepsilon = 3\%$  and annealed at temperatures  $T = 300$  °C (2 hours) and  $T = 630$  °C (2 hours), which made it possible to obtain samples with an average grain size  $\bar{d} = 5\div 15$  mm, so that only one layer of grains (two-dimensional polycrystal) was placed in the cross section of the sample, and a “pancake” grain structure was formed, in which the grain sizes in the directions of length and width of the sample significantly exceeded the thickness of the sample.

### 2.2. Specimen surface and grain structure

The grain structure on the surface of the samples was revealed by chemical etching using an etchant of the following composition: 30 ml of HCl, 20 ml of HNO<sub>3</sub>, 5 ml of HF, 30 ml of H<sub>2</sub>O (etching time is 10 s).

The crystallographic orientation of grains in two-dimensional aluminum polycrystals before and after deformation was determined by the direct Laue method. To study the deformation relief on the surface of grains of two-dimensional aluminum polycrystals, an MIM-8 optical microscope and a Jeol JSM-840 scanning electron microscope were used.

### 2.3. Tensile testing

As it is known, the loading method has a significant effect on the nature of the plastic deformation of the metal. Plastic deformation of a polycrystal under load is provided by two mechanisms - translational and rotational [13]. The second one is caused by the appearance of a field of turning moments in a deformable solid. Depending on the type of loading, various methods of relaxation of this field are implemented. Experiments on active tensile loading are fundamental, since they make it possible to involve practically all the mechanisms of relaxation of the rotational moment field due to a continuous increase in the external load with a change in the rate and degree of deformation over a wide range [13]. Therefore, in this work, mechanical tests of two-dimensional aluminum polycrystals were carried out by tension under conditions of active loading. The samples were tested on air with a constant strain rate  $\dot{\varepsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  and temperature  $T = 293\text{K}$  until the failure.

## 3. Dislocation slip and rotations of the grain lattice

### 3.1. Model

During the movement of individual dislocations, the translation of the nodes of the crystal lattice occurs, but the direction of the crystallographic axes remains unchanged. The emerging shears of the layers of the crystalline material can be well illustrated by the model of sliding plates (Fig. 1) In this case, the sample axis AB, which coincides with the tensile axis before the onset of deformation, changes its position in space (Fig. 1b) [1, 17]. Thus, the free movement of dislocations along the crystal causes the shape change and rotation of the AB axis of the sample, without changing the crystallographic orientation (rotation with an invariant lattice) [12, 13]. However, in the presence of rigid grips of the tensile testing machine, which can only move along the tensile axis, such change in the direction of the AB axis, i.e. rotation with an invariant lattice (Fig. 1b) is impossible. Under conditions of active loading, the sample axis must always coincide with the tensile axis (Fig. 1c). In a single-crystal sample, the fulfillment of this requirement leads to a rotation of its crystal lattice (Fig. 1c), while the direction of sliding turns to the tensile axis, tending to coincide with it [1, 11, 17].

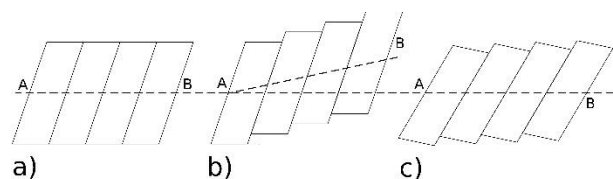


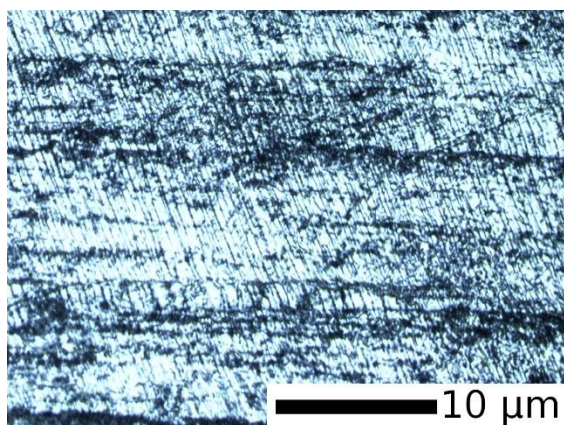
Fig. 1. Scheme of tensile deformation of a single-crystal sample in the model of sliding plates (traces of sliding planes are shown by diagonal lines, the tensile axis is shown by a horizontal dashed line).

When moving from a single-crystal sample to a polycrystalline one, the nature of plastic deformation becomes much more complicated. The requirement to preserve the continuity of the material makes it impossible to rotate with an invariant lattice of a grain in a polycrystal. For the selected grain, the surrounding grains at first approximation represent a rigid matrix. Grain boundaries are effective barriers to moving dislocations. They cause constraint of plastic deformation starting from the early stages of its development. As a result, reactive forces arise that cause plastic rotation of the selected grain relative to the surrounding rigid matrix [12, 13]. This causes a change in the crystallographic orientation of the grain. A quantitative description of this rotation is based on calculations of shear deformation in active slip systems [11 – 14]:

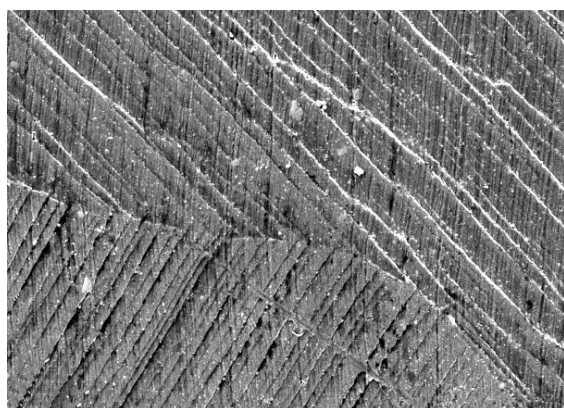
$$\Delta\vec{\omega} = -\frac{1}{2} \sum_p \Delta\gamma_p [\vec{n}_p, \vec{t}_p], \quad (1) \quad \vec{\omega} \parallel [\vec{t}, \vec{n}], \quad (2)$$

where  $\Delta\vec{\omega}$  is rotation leading to plastic rotation of the crystal lattice;  $\Delta\gamma_p$ ,  $\vec{n}_p$  and  $\vec{t}_p$  are the increment of the shear deformation, the normal to the slip plane, and the unit vector in the shear direction for the p-th active slip system respectively.

The aim of this work is to study this type of rotation in two-dimensional aluminum polycrystals with a “pancake” grain structure. The feature of such objects is that there is no constraint of plastic deformation along the thickness of the sample [9, 10], as a result, dislocation slip in grains occurs practically only in the primary slip system, as observed by the experimental data (Fig. 2).



a)



b)

*Fig. 2. Images of the surface of grains of deformed specimens with traces of dislocation slip, obtained using an MIM-8 optical microscope (a) and a Jeol JSM-840 electron microscope (b).*

Based on equation (1) the following expression can be written:

i. e. the axis of rotation of the crystal lattice of the grain is perpendicular to the plane lying on the unit vectors of the normal to the slip plane  $\vec{n}$  and the direction of slip  $\vec{t}$  of the primary slip system. From (2) it follows that during the process of deformation the axis of rotation  $\vec{\omega}$  does not change its direction, and the vectors  $\vec{n}$  and  $\vec{t}$  rotate in the plane perpendicular to  $\vec{\omega}$ . That means means the angle between the axis of rotation  $\vec{\omega}$  and the tensile axis  $\vec{\sigma}$  remains constant. We will examine two coordinate systems: laboratory (one of the axes of which is the axis of tensile  $\vec{\sigma}$ ), and crystallographic (axes of which are the crystallographic directions in the grain of the polycrystal). The rotation of the crystal lattice during the process of plastic deformation means the rotation of the crystallographic coordinate system relative to the laboratory one. In the crystallographic coordinate system, a constant angle between  $\vec{\omega}$  and  $\vec{\sigma}$  means that during the process of grain rotation, the tensile axis precesses around the direction of the rotation axis (Fig. 3).

If the initial crystallographic orientation of the grain is such that the tensile axis  $\vec{\sigma}$  lies in the plane of the vectors  $\vec{n}$  and  $\vec{t}$ , then the grain will rotate so that the direction  $\vec{\sigma}$  moves towards  $\vec{t}$  and angle between them tends to zero. In this case, trace of  $\vec{\sigma}$  on the stereographic projection goes to pole [101] as for a single-crystal sample [1, 10, 11]. Another case is when three unit vectors  $\vec{n}$ ,  $\vec{t}$  and  $\vec{\sigma}$  are not coplanar, i.e. when the angle between  $\vec{\omega}$  and  $\vec{\sigma}$  is not a right angle (Fig. 3). Calculation shows that trace of the  $\vec{\sigma}$  axis on the stereographic projection does not pass through the [101]. Indeed, if we choose  $(11\bar{1})[101]$  as the primary slip system, then in the crystallographic coordinate system of the grain, the unit vector of the rotation axis is defined as  $\vec{\omega} = [1, -2, -1] / \sqrt{6}$ . The precession of the end of the unit vector  $\vec{\sigma}$  means that it is moving on a circle (Fig. 3), the equation of which on the stereographic projection can be written as:

$$(\mathbf{u} - \mathbf{u}_0)^2 + (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 = R^2, \quad (3)$$

where  $\mathbf{u}, \mathbf{v}$  are the coordinates of a point on a circle in the stereographic projection plane,  $\mathbf{u}_0, \mathbf{v}_0$  are coordinates of the center and  $R$  is the radius. For the primary system:

$$\mathbf{u}_0 = -2 / (1 + \sqrt{6}(\vec{\omega}, \vec{\sigma})), \quad \mathbf{v}_0 = -1 / (1 + \sqrt{6}(\vec{\omega}, \vec{\sigma})),$$

$$R = \sqrt{(1 - (\vec{\omega}, \vec{\sigma})^2) / (1 / \sqrt{6} + (\vec{\omega}, \vec{\sigma}))^2}.$$

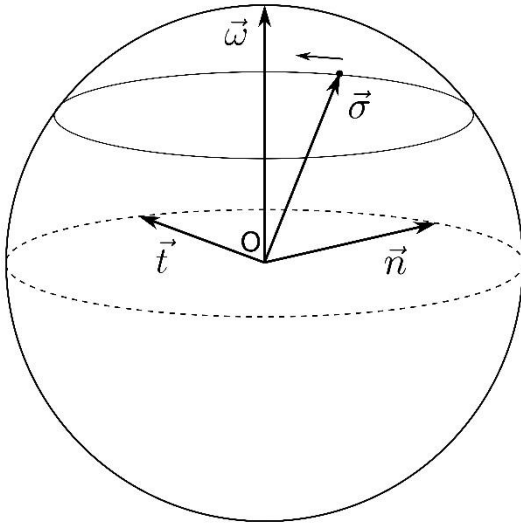


Fig. 3. Scheme of the trace of the tensile axis  $\vec{\sigma}$  on the sphere of stereographic projection during rotation of the grain crystal lattice during deformation ( $\vec{n}$ ,  $\vec{t}$ ,  $\vec{\omega}$ ,  $\vec{\sigma}$  are unit vectors).

Fig. 4 shows the traces of the tensile axis  $\vec{\sigma}$  on the stereographic projection during the rotation of the grain crystal lattice during deformation in case when primary slip system  $(11\bar{1})[101]$  is active. These traces should be observed in the main stereographic triangle, since the slip system  $(11\bar{1})[101]$  has the maximum Schmid factor within this triangle.

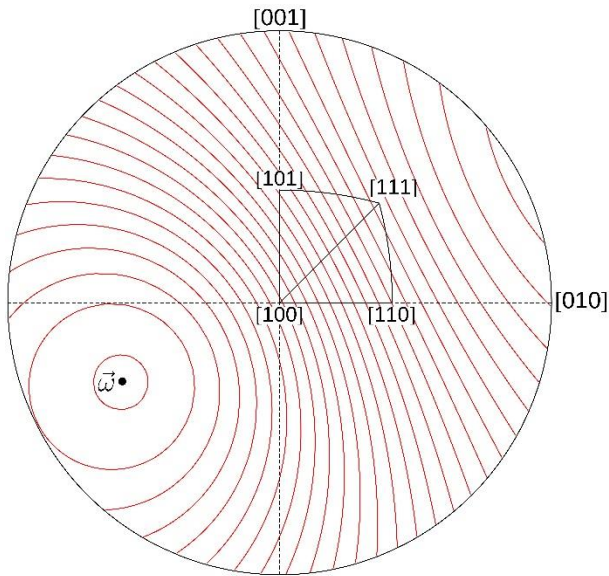


Fig. 4. Circles on the stereographic projection corresponding to equation (3).

When the projection of the tensile axis  $\vec{\sigma}$  reaches the boundary of the standard and its conjugate stereographic triangles, the conjugate slip system should be activated and

double slip should occur [1]. Therefore, it is of interest to construct the traces of the tensile axis for a conjugate slip system from a conjugate stereographic triangle. The problem is solved similarly as for a standard triangle. The corresponding traces are shown in Fig. 5.

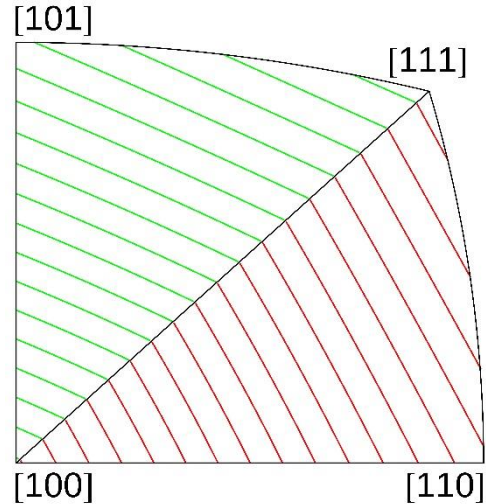


Fig. 5. Traces of the tensile axis  $\vec{\sigma}$  on the stereographic projection during the rotation of the grain crystal lattice during the deformation for the cases of action of only the primary (standard triangle) and conjugate (conjugate triangle) slip systems.

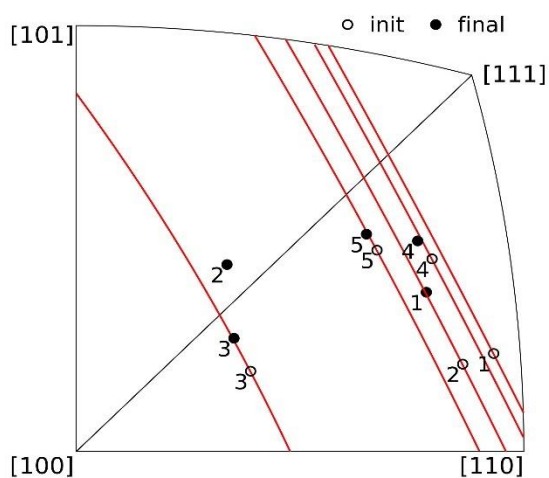
As can be seen from Fig. 4 and 5, traces of the tensile axis for primary slip system  $(11\bar{1})[101]$  depend on the initial crystallographic orientation of the grain and are not pass through  $[101]$ , that fundamentally distinguish the evolution of the rotation of a polycrystal grain from the rotation of a single-crystal sample. As noted, an exceptional case is when the vectors  $\vec{n}$ ,  $\vec{t}$  and  $\vec{\sigma}$  are coplanar. Then the traces of the tensile axis tends exactly to the  $[101]$ .

### 3.2. Experimental results and discussion

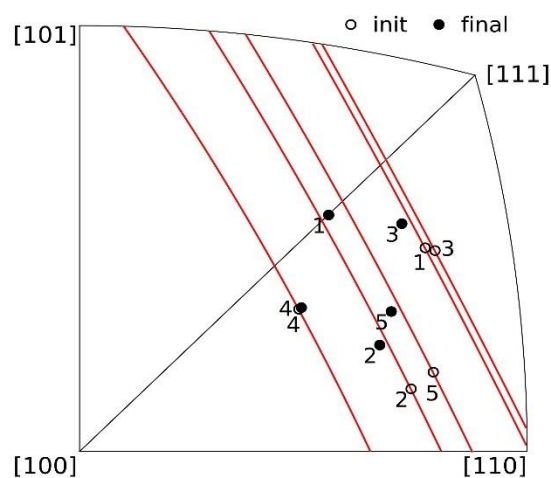
To verify proposed model, calculated traces of the tensile axis rotation based on Eq. (3) must be compared with the experimental data. It should be noted that the validity of the assumption about the dominant effect of the primary slip system is confirmed by the results of studying the surface of deformed samples by optical and electron microscopy. On fig. Figure 2 shown images of the deformation relief of the grain surface, illustrating the fact that, in most cases, dislocation slip in grains of two-dimensional polycrystalline aluminum foils with a “pancake” grain structure under active tension at room temperature occurs mainly in one primary slip system. The images of the microstructure clearly show traces of sliding only for the primary system within grains (Fig. 2a) and at

the boundary of two grains (Fig. 2b). Vertical lines parallel to the tensile axis  $\bar{\sigma}$  are residual traces of foil rolling (samples were cut parallel to the rolling direction during preparation). Such mechanical behavior of two-

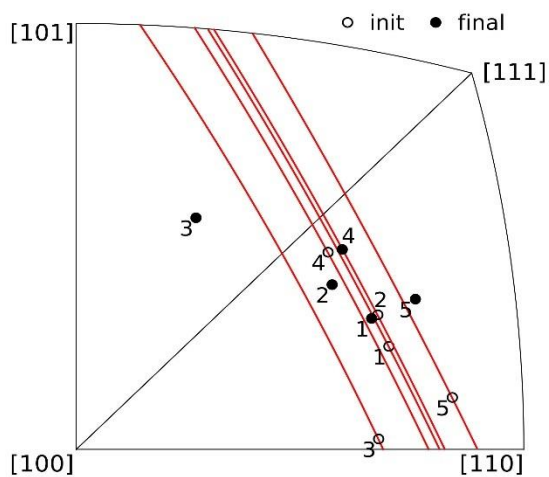
dimensional polycrystals is presumably can be related to absence of constraint in the grain structure (there is only one layer of grains), as same holds for plastic deformation over the thickness of the sample.



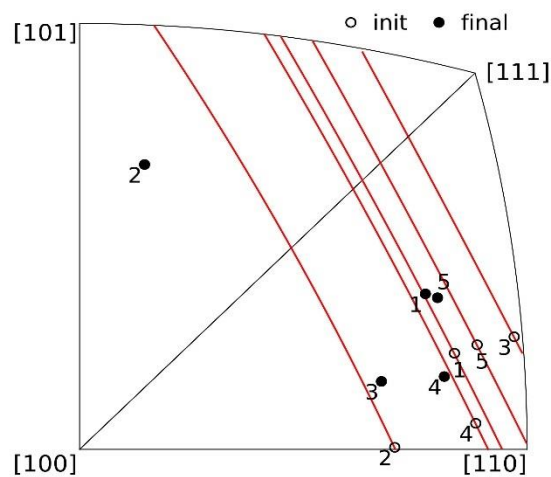
(a) sample 1 ( $\varepsilon = 12.02\%$ )



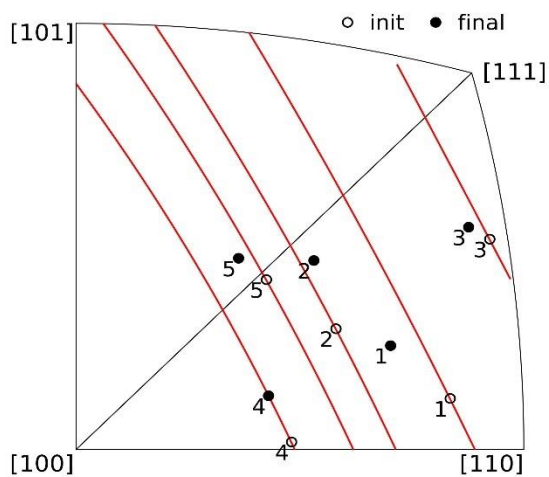
(b) sample 2 ( $\varepsilon = 9.89\%$ )



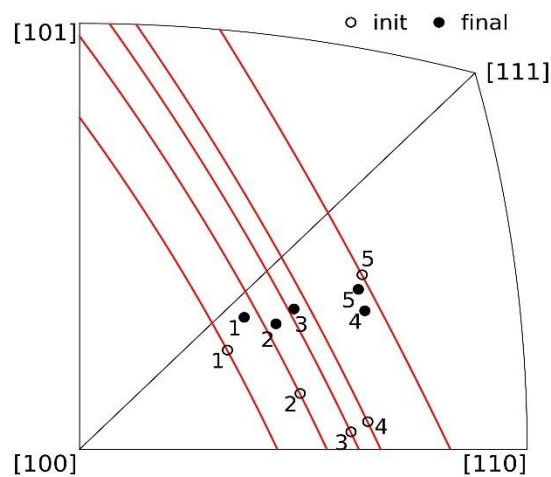
(c) sample 3 ( $\varepsilon = 15.11\%$ )



(d) sample 4 ( $\varepsilon = 13.69\%$ )



(e) sample 5 ( $\varepsilon = 9.34\%$ )



(f) sample 6 ( $\varepsilon = 12.03\%$ )

*Fig. 6. Orientation of the tensile axis before and after deformation in grains of two-dimensional polycrystalline aluminum foils with a “pancake” grain structure, determined from the data of X-ray studies, and model traces of rotation of the tensile axis, calculated assuming the action of the primary slip system only.*

To compare the calculated traces of the rotation of the tensile axis with the experimental data, the crystallographic orientation of grains of two-dimensional polycrystalline aluminum foils with a “pancake” grain structure was determined by X-ray before and after deformation. The results are shown in Fig. 6. For grains in which tensile axis  $\vec{\sigma}$  before deformation lies in the plane based on the vectors of the normal to the slip plane  $\vec{n}$  and the slip direction  $\vec{t}$ , the trace of the rotation of the tensile axis tends to [101] (grain 2 in sample 6 in Fig. 6f) as for a single crystal sample. For grains in which before deformation the vectors  $\vec{n}$ ,  $\vec{t}$  and  $\vec{\sigma}$  are not coplanar, the rotation trace does not intersect [101], but moves along the circular arc described by equation (3). Thus, the rotation of the crystal lattice of grains in a polycrystal is fundamentally different from the rotation of a single-crystal sample, for which the trace of rotation of the tensile axis must always cross [101]. Comparison of the experimental traces of rotation of the tensile axis (according to the results of X-ray diffraction determination of the crystallographic orientation of grains before and after deformation) with the calculated traces of the rotation of the tensile axis due to the action of the primary slip system indicates their good agreement. It should be noted that, according to [4, 18], the operating slip system in thin crystals and foils might be a system with not the highest Schmid factor. Experiments show that the active system is the one for which the path length of edge dislocations to the sample surface is minimal, which provides the smallest dislocation hardening. In our samples, the active slip system within the grain was either a system with a maximum value of the Schmid factor, or a system with a value close to it. If the active slip system is not the primary system (the one with the maximum Schmid factor), then this does not affect the nature of the traces of the tensile axis rotation, in the sense that the traces are still determined by Eq. (3). In this case, the axis of rotation  $\vec{\omega}$  determined according to (2), the traces (circular arcs) of the axis rotation along with the corresponding coefficients of equation (3) will be different than for the primary slip system. However, this does not fundamentally change anything in our model.

It should be noted that for some grains, for example, on Fig. 6 (grain 2 in sample 1, grain 3 in sample 3, grain 2 in sample 4, grain 5 in sample 5), the projection of the tensile axis during the process of rotation “overshoots” into the conjugate stereographic triangle and moves in the direction of the circular arc determined by the equation (3), but deviating from the calculated trace. The reason for this seems to be that the secondary slip system is activated. In this case, for the theoretical calculation of the rotation traces, it is necessary to use relation (1), which takes into account the contribution of all operating slip systems.

However, the fact that, during the process of rotation, the projection of the tension axis is not stay at the boundary of the standard and conjugate stereographic triangles, but “overshoots” into the second triangle, indicates the dominance of the primary slip system. Differences in the degree of rotation of different grains are caused by differences in the local deformation of these grains. With an increase in the degree of local deformation, the angle of rotation of the crystal lattice also increases.

#### 4. Conclusions

1. A model for the rotation of the FCC lattice of grains of a two-dimensional polycrystals with a “pancake” grain structure due to the development of dislocation slip in the primary slip system upon deformation under active tension is proposed. An equation for the rotation traces of the tensile axis on the stereographic projection during the process of deformation is derived.

2. Modeling of the tensile axis rotation traces shows that, depending on the initial crystallographic orientation of the polycrystal grain, two cases of rotation are possible. If the tensile axis before deformation lies in the plane containing normal to the slip plane and the slip direction, then the trace of rotation passes through [101] direction as for a single crystal sample. In the case when vectors of normal to the slip plane, the slip directions, and the tensile axis are not coplanar, then traces of rotation are not pass through [101], but moving on arc of a circle defined by the equation obtained for proposed model. This case of rotation of the crystal lattice of a polycrystal grain is fundamentally differs from the rotation of a single crystal sample.

3. Based on the results of studying the surface of deformed samples by optical and electron microscopy, it was shown that, in most cases, dislocation slip in grains of two-dimensional polycrystalline aluminum foils with a “pancake” grain structure under active tension at room temperature occurs mainly in one primary slip system, which, presumably due to the absence of constraint of the grain structure and plastic deformation along the thickness of the sample. Experimental data of the tensile axis rotation traces (based on the results of X-ray diffraction determination of the crystallographic orientation of grains before and after deformation) indicates good agreement with the calculated data for the rotation traces of the tensile axis due to the action of the primary slip system.

#### References

1. R. W. K. Honeycombe. *The plastic deformation of metals*. 2nd ed., (London, Baltimore, Md., U.S.A., E. Arnold, 1984), 483 p.
2. U.F. Kocks, H. Mecking. *Progr. Mater. Sci.* **48**, 171-273, (2003). [https://doi.org/10.1016/S0079-6425\(02\)00003-8](https://doi.org/10.1016/S0079-6425(02)00003-8)

3. P.J. Janssen, T.H. de Keijser, M.G. Geers. Mater. Sci. Eng. A **419**, 238-248, (2006). <https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.12.029>
4. G.A. Malygin Phys.-Usp. **54**, 1091, (2011). <https://doi.org/10.3367/UFNr.0181.201111a.1129>
5. G.A. Malygin Physics of the Solid State, **54** (3), 559-567, (2012). <https://doi.org/10.1134/S1063783412030171>
6. K.M. Davoudi, J.J. Vlassak J. Appl. Phys. **123**, 085302, (2018). <https://doi.org/10.1063/1.5013213>
7. H.-J. Lee, P. Zhang, J.C. Bravman J. Appl. Phys., **93** (3), 1443-1451, (2003). <https://doi.org/10.1063/1.1532933>
8. T.R. Bieler, R. Alizadeh, M. Peña-Ortega, J. Llorca International Journal of Plasticity, **118**, 269-290, (2019). <https://doi.org/10.1016/j.ijsplas.2019.02.014>
9. E.E. Badiyan, A.G. Tonkopyrad, O.V. Shekhovtsov, R.V. Shurinov, T.R. Zetova, K.S. Kazachkova. Functional Materials, **3** (22), 396-400, (2015). <https://doi.org/10.15407/fm22.03.396>
10. E.E. Badiyan, A.G. Tonkopyrad, Ye.V. Ftomov, O.V. Shekhovtsov. Problems of Atomic Science and Technology (Pure Materials and the Vacuum Technologies). **1** (125). 56-59, (2020). <https://doi.org/10.46813/2020-125-056>
11. W.F. Hosford. Texture of Crystalline Solids, **2**, 175-182, (1977). <https://doi.org/10.1155/TSM.2.175>
12. R.J. Asaro. Adv. in Appl. Mech., **23**, 1-115, (1983). [https://doi.org/10.1016/S0065-2156\(08\)70242-4](https://doi.org/10.1016/S0065-2156(08)70242-4)
13. V.V. Rybin. Bol'shiye plasticheskiye deformatsii i razrusheniye metallov, (Metallurgiya, Moscow, 1986), 224 p. (В.В. Рыбин. Большие пластические деформации и разрушение металлов, (Металлургия, Москва, 1986), 224 с.). [In Russian]
14. V.V. Rybin, YU.F. Titovets, N.YU. Zolotarevskiy, A.K. Samoylov Disklinatsii i rotatsionnaya deformatsiya tverdykh tel: Sb. nauchn. tr. (LFTI, Leningrad, 1990) pp. 205–214 (В.В. Рыбин, Ю.Ф. Титовец, Н.Ю. Золоторевский, А.К. Самойлов Дисклинации и ротационная деформация твердых тел: Сб. научн. тр. (ЛФТИ, Ленинград, 1990) с. 205–214). [In Russian]
15. Jun-Hyun Han, Kim Dong-Ik, Jeeb Kwang-Koo, and Oh Kyu Hwan, Materials Science Forum, **449-452**, 593-596. (2004). <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.449-452.593>
16. P. Chen, S.C. Mao, Y. Liu, F. Wang, Y.F. Zhang, Z. Zhang, X.D. Han. Mater. Sci. Eng. A, **580** 114-124, (2013). <https://doi.org/10.1016/j.msea.2013.05.046>
17. M. Maj, M. Nowak, S. Musiał, T. Płociński. Materials Science & Engineering A, **790**, 139725, (2020). <https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.139725>
18. T.L. Wu, R. Smoluchowski. Physical Review, **78** (4), 468–469, (1950). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.78.468>



PACS: 43.00.00

UDC: 534.8

## Sound resonances in supercritical and superfluid helium

N.O. Herashchenko, K.E. Nemchenko, T.G. Vikhtinskaya, S.Yu. Rogova

*Education and Research Institute of Computational Physics and Energy, V.N. Karazin Kharkiv National University, Svobody Sq. 4, 61077, Kharkiv, Ukraine*

ORCID: 0000-0001-6580-5991

DOI:10.26565/2222-5617-2021-34-05

For twenty years of research, the processes of radiation and dissipation occurring during oscillations of quartz tuning forks in superfluid helium and its mixtures have turned from an object of research into a tool for studying the properties of helium. Quartz tuning forks are used to study various properties of helium - viscosity, thermal conductivity, radiation of the first and second sounds, and also as a precision temperature sensor. Experimental observations of these phenomena were carried out in a wide range of temperatures and pressures, but the results of observations have not yet been exhaustively described theoretically.

The aim of this work is to study density and pressure oscillations to determine the conditions under which oscillations of a solid wall excite the first sound in superfluid helium and sound in supercritical helium, and to calculate the contributions of these processes to the formation of resonances during oscillations of closed tuning forks. In particular, the experimentally observed excitation of standing waves of pressure oscillations by an oscillating closed tuning fork, the appearance and properties of resonances depending on the temperature and pressure of helium are considered.

As a result of the work, a model was built that described the physical features of the experimentally observed resonance phenomena.

**Keywords:** acoustic resonance, superfluid helium, supercritical helium, standing wave, density fluctuations.

## Звукові резонанси в надкритичному і надрідкому гелії

Н.О. Геращенко, К.Е. Немченко, Т.Г. Віхтинська, С.Ю.Рогова

*ІНІ комп'ютерної фізики та енергетики, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, м. Свободи 4, 61022, Харків, Україна*

За двадцять років досліджень, процеси випромінювання та дисипації, які відбуваються при коливаннях кварцових камертонів у надплинному гелії та його розчинах, із об'єкта дослідження перетворилися в інструмент для дослідження властивостей гелію. Кварцові камертони використовуються для дослідження різних властивостей гелію – в'язкості, теплопровідності, випромінювання першого та другого звуку, а також як прецизійний датчик температури. Експериментальні спостереження цих явищ проводилися у широкому діапазоні температур та тиску, але результати спостережень ще не отримали вичерпного теоретичного опису.

Метою даної роботи є дослідження коливань густини та тиску для визначення умов, за яких коливання твердої стінки збуджують перший звук у надплинному гелії та звук у надкритичному гелії, і обчислення внесків цих процесів до формування резонансів під час коливань закритих камертонів. Зокрема, розглянуто експериментально спостережуване збудження стоячих хвиль коливань тиску камертоном, що коливається, поява і властивості резонансів в залежності від температури та тиску гелію.

В результаті роботи побудована модель, що описує фізичні властивості резонансних явищ, які спостерігалися експериментально.

**Ключові слова:** акустичний резонанс, надплинний гелій, надкритичний гелій, стояча хвиля, коливання густини.

## Звуковые резонансы в сверхкритическом и сверхтекучем гелии

Н.О. Геращенко, К.Е. Немченко, Т.Г. Вихтинская, С.Ю.Рогова

*УНИ компьютерной физики и энергетики, Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина, м. Свободы 4, 61022, Харьков, Украина*

За двадцать лет исследований процессы излучения и диссипации, происходящие при колебаниях кварцевых камертонов в сверхтекучем гелии и его растворах, из объекта исследования превратились в инструмент для изучения свойств гелия. Кварцевые камертоны используются для исследования различных свойств гелия – вязкости, теплопроводности, излучения первого и второго звука, а также в качестве прецизионного датчика температуры. Экспериментальные наблюдения этих явлений проводились в широком диапазоне температур и давлений, но результаты наблюдений еще не получили исчерпывающего теоретического описания.

Целью данной работы является исследование колебаний плотности и давления для определения условий, при которых колебания твердой стенки возбуждают первый звук в сверхтекучем гелии и звук в сверхкритическом гелии, и вычисление вкладов этих процессов в формирование резонансов во время колебаний закрытых камертонов. В частности, рассмотрены экспериментально наблюдаемое возбуждение стоячих волн колебаний давления колеблющимся закрытым камертоном,

возникновение и свойства резонансов в зависимости от температуры и давления гелия.

В результате работы была построена модель, описывающая физические особенности экспериментально наблюдаемых резонансных явлений.

**Ключевые слова:** акустический резонанс, сверхтекучий гелий, сверхкритический гелий, стоячая волна, колебания плотности.

For the last twenty years, the processes of radiation and dissipation by oscillating quartz tuning forks in superfluid helium and in the mixtures of helium isotopes have turned from an object of research into a tool for studying the properties of helium [1, 2].

The experiments, on which our theoretical research is based, were provided in Ref.3, in which the dependences of resonances on temperature and pressure, as well as the overlap of resonances were observed. These phenomena have a very obvious explanation, but have not yet received a quantitative description.

In Ref.3 the acoustic resonances were studied in liquid helium and its  $^3\text{He} - ^4\text{He}$  superfluid mixtures during three experiments, in each of which quartz tuning forks were immersed in a cell filled with liquid, the main resonant frequency of which in vacuum is about 32.768 Hz. These piezoelectric tuning forks were excited by alternating voltages at electrodes located on a quartz crystal.

Due to the rather complex geometry of the experimental setup, the resonance spectrum can be determined with certain assumptions. That is, the properties of tuning forks and their acoustic modes do not provide an accurate quantitative determination of the speed of sound. Therefore, as a result in [3] only approximate and qualitative conclusions are given.

In order to describe the phenomena that manifested themselves during experiments with a quartz tuning fork oscillating in superfluid  $^3\text{He} - ^4\text{He}$  solutions of various concentrations, this paper proposes the use of a certain model that can help to describe the obtained results with definite accuracy.

Therefore, in order to consider the conditions under which the resonances of the first and second sounds can be observed, we consider a one-dimensional model of a bounded vessel in which there is a fixed wall on one side and an oscillating one on the opposite side. This model focuses on the study of simultaneous generation of collective modes, as well as the dependence of the intensity distribution between these modes depending on the temperature and concentration of solutions. At the same time the proposed model does not take into account the specific shape of the quartz tuning fork and the cylindrical shape of the flask.

To solve this problem, we consider the oscillations of the pressure, density and velocity, and the perturbation of entropy, temperature and concentration will not be taken into account. In this case the complete system [4] of the hydrodynamic equations for  $^3\text{He} - ^4\text{He}$  superfluid mixtures

is reduced to that describe the relationship between pressure and density, when entropy and concentration are constant.

$$\begin{cases} \frac{1}{c_1^2} \frac{\partial P}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial V}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial V}{\partial t} + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial x} = v_{eff} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \end{cases} \quad (1)$$

Here  $c_1 = \sqrt{(\partial P / \partial \rho)_{\sigma, c}}$  is the velocity of sound in supercritical helium, or the velocity of the first sound in superfluid helium, taken at the constant entropy and concentrations,  $v_{eff}$  is the effective viscosity coefficient.

To study the qualitative features of the generating and the overlapping of the resonances, consider a model system of a narrow vessel with helium, in which one wall is stationary, and instead of another is an oscillator with a given mass, stiffness, natural frequency and quality factor. This model does not take into account the geometric features of the oscillations of the tuning forks in a closed flask, but can be used to study the physical features of the resonances.

The equation of motion for the moving wall can be written as follows:

$$M \ddot{x} = -k(x-L) - \tilde{\gamma} \dot{x} + AP(x=L)e^{-i\omega t} + F_0 e^{-i\omega t}, \quad (2)$$

where  $M$  is the mass,  $k$  is the stiffness,  $\tilde{\gamma}$  if the friction coefficient,  $A$  is the cross section of the vessel,  $P(x=L)$  is the pressure of the mixture at the coordinates  $x=L$  of oscillating wall,  $F_0$  is the amplitude and  $\omega$  is the frequency of the external force. After division by mass we get the equation that complements the system (1)

$$\ddot{x} = -\omega_0^2(x-L) - \gamma \omega_0 \dot{x} + \alpha P_0(x=L)e^{-i\omega t} + a_0 e^{-i\omega t} \quad (3)$$

Here  $\omega_0 = \sqrt{k/M}$  and  $\gamma$  are the natural frequency and the quality of the oscillator,  $\alpha = A/M$ , and  $a_0 = F_0/M$  is the acceleration amplitude.

The solution of the system of the equations (1) and (3) gives the results for the squared velocity amplitude of the oscillating wall in the presence of the liquid in the vessel:

$$|V_0|^2 = \frac{\omega^2 |a_0|^2}{\left( \left( (\omega^2 - \omega_0^2) \sin(\omega L / c_1) - \lambda \omega \omega_0 \right)^2 + \left( \omega \omega_0 \gamma \sin(\omega L / c_1) + y (\omega^2 - \omega_0^2) \right)^2 \right)}. \quad (4)$$

Here  $\lambda = \alpha \rho_0 c_1 / \omega_0$  is the dimensionless coefficient of resonances "interaction" that describes the overlapping, and the coefficient  $y = \omega^2 L v_{eff} / 2c_1^3$  describes the effective width of the sound resonances.

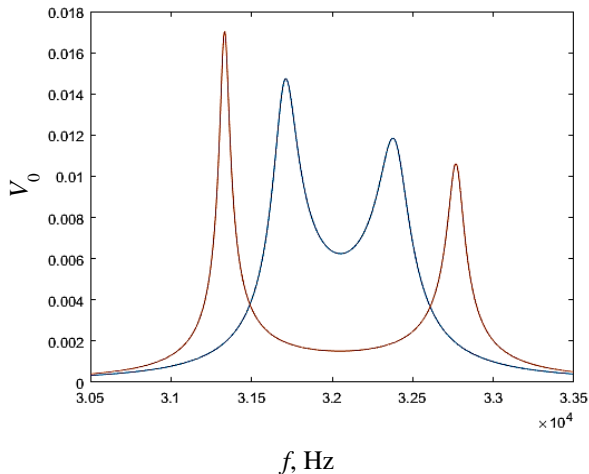


Fig. 1. Resonant sound curves in supercritical helium. The blue line indicates the result taking into account the coefficient of "overlap" of resonances, and the orange - the value of this coefficient is zero

Expression (3) solves the problem about the resonances which are caused by vibrations of quartz tuning forks, as well as sound vibrations in helium. This expression allows one to describe the overlap of these resonances and to give a quantitative description of the phenomena observed in the experiments from Ref. 3.

Figure 1 shows an example of close resonances of driving and acoustic vibrations in the absence of overlap (orange line) and in the presence of overlap (blue line). The graphs presented are calculated using formula (3) and qualitatively describe the dependences observed in the experiment (see Fig. 3 of the Ref. 3.)

For the case of liquid helium, expression (3) describes the resonances of the first sound in the superfluidity region and the ordinary sound in the normal region. The temperature dependence of these resonances is shown in Fig. 2 and covers the temperature range from 1.25 K to 4.25, which includes the lambda-transition to the superfluid state. The calculated dependences qualitatively and quantitatively coincide with those observed in the experiment (see Fig. 5 of the Ref. 3.)).

Finally, the paper carried out a theoretical study on the energy dissipation of body, which oscillates in supercritical and superfluid helium and its solutions. During the work, the physical principles that cause the appearance and overlap of resonances caused by oscillations of quartz

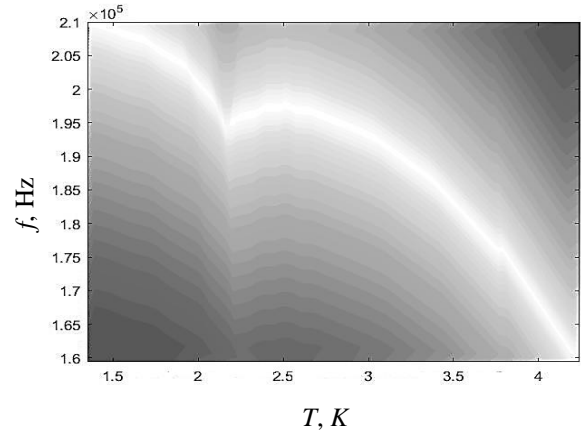


Fig. 2. Resonances of the first sound in superfluid helium depending on temperature and sound in the normal helium. The presence of resonant frequencies is indicated by a light color

tuning forks as well as hydrodynamic modes in helium are considered.

A model that can explain the physical properties of resonant phenomena observed experimentally has been developed.

Explicit analytical expression (3) for resonance curves, which are caused by the first sound in superfluid helium, are obtained, and corresponding graphs are constructed.

Comparison with the experiment revealed that the results obtained with some accuracy coincide with the experimentally obtained data.

A method for calculating the parameters of resonant curves is proposed, which allows developing algorithms for further study of different types of interaction of tuning forks with helium.

## References/Literature

1. D.O. Clubb, O.V.L. Buu, R.M. Bowley, R. Nyman, and J.R. Owers-Bradley. *J. Low Temp. Phys.*, **136**, 1 (2004). <https://doi.org/10.1023/B:JOLT.0000035368.63197.16>
2. D. Schmoranzler, M. La Mantia, G. Sheshin, I. Gritsenko, A. Zadorozhko, M. Rotter, and L. Skrbek. *J. Low Temp. Phys.*, **163**, 317 (2011). <https://doi.org/10.1007/s10909-011-0353-1>
3. A. Salmela, J. Tuoriniemi, J. Rysti. *J. Low Temp. Phys.*, **162**, 678 (2011). <https://doi.org/10.1007/s10909-010-0246-8>
4. I.M. Khalatnikov, *Theory of Superfluidity*, (Nauka, Moscow, 1970), 160 p. (И.М. Халатников, *Теория сверхтекучести*, (Наука, Москва, 1970), 160 с.). [In Russian]
5. K. Nemchenko, S. Rogova, T. Vikhtinskaya. *J. Low Temp. Phys.*, **187**, 324, (2017). <https://doi.org/10.1007/s10909-017-1761-7>
6. E.Ya. Rudavsky, V.K. Chagovets, G.A. Sheshin, V.A. Vrakina. *Low Temperature Physics*, **46**, 49, (2020). (Э.Я. Рудавский, В.К. Чаговец, Г.А. Шешин, В.А. Вракина. *Физика низких температур*, **46**, 49, (2020)). [In Russian]

PACS 44.90.+c

UDC: 536.248

## Analytical consideration of particle transport in 1D nanostructures

J. Amrit<sup>1</sup>, T. Medintseva<sup>2</sup>, K. Nemchenko<sup>2</sup>, T. Vikhtinskaya<sup>2</sup>

<sup>1</sup> LIMS-CNRS, Université Paris-Saclay, 91405, Orsay, France

<sup>2</sup> V.N. Karazin Kharkiv National University, Svobody sq, 4, 61022, Kharkiv, Ukraine

ORCID:

DOI:10.26565/2222-5617-2021-34-06

The paper presents an analytical study of one-dimensional fluxes of ballistic quasiparticles in the presence of scattering centers. Such a situation can be realized at very low temperatures or systems of very small sizes – nanostructures. To describe such a situation, the approach of heat transfer by radiation, which goes back to Casimir, is used, in which the interaction of phonons with image boundaries is taken into account, or, for example, the Landauer approach, where the probability of phonon transition from the initial state to the final state is introduced. At the same time, the intermediate regime, the mean free path of phonons due to their interaction with each other, is comparable to the size of the samples; to this day, it remains a rather difficult problem for a theoretical or numerical solution. In this work, we propose the probabilistic approach in the Landauer model to describe heat transfer in the one-dimensional ballistic motion of quasiparticles. Within the framework of the theory of random walks, a model of successive scattering centers is considered. An explicit analytical expression is obtained for the dependence of the flux of quasiparticles on the probability of scattering and the number of scattering centers. In order to explain the physical sense of the obtained result the comparison with the result of iterative approach is made. As well the results are used for description of the problem of the heat flux in multilayered structures, in which one should take into account not only the thermal resistance inside the layers, but also the Kapitza resistance between the layers. The practical application of the obtained results to one-dimensional nanostructures and to quasi-one-dimensional heat-conducting systems is discussed, various limiting cases are considered and a comparison with experimental data is made.

**Keywords:** quasiparticles, nanostructures, heat transfer, one-dimensional motion, scattering centers.

## Аналітичний розгляд переносу частинок в одновимірних наноструктурах

Й. Амрит<sup>1</sup>, Т. Медінцева<sup>2</sup>, К. Немченко<sup>2</sup>, Т. Віхтинська<sup>2</sup>

<sup>1</sup> LIMS-CNRS, Université Paris-Saclay, 91405, Orsay, France

<sup>2</sup> Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, м. Свободи 4, 61022, Харків, Україна

У статті представлено аналітичне дослідження одновимірних потоків балістичних квазічастинок у присутності центрів розсіювання. Така ситуація може реалізуватися при дуже низьких температурах або у системах дуже малих розмірів – наноструктурах. Для опису такої ситуації використовується підхід теплопередачі випромінюванням, що сходить до Казимира, в якому враховується взаємодія фононів з межами зразків, або, наприклад, підхід Ландауера, де введено ймовірність фононного переходу з початкового стану в кінцевий. У той же час існує проміжний режим, коли середній вільний пробіг фононів внаслідок їх взаємодії між собою, зрівнюється з розміром зразків. На сьогоднішній день опис цього режиму залишається досить складною проблемою для теоретичного чи чисельного розв'язання. У цій роботі ми пропонуємо ймовірнісний підхід у моделі Ландауера для опису теплопередачі в одновимірному балістичному русі квазічастинок. В рамках теорії випадкових блукань розглядається модель послідовних центрів розсіювання. В результаті роботи отримано явний аналітичний вираз для залежності потоку квазічастинок від ймовірності розсіювання та кількості центрів розсіювання. Для пояснення фізичного сенсу отриманого результату проводиться порівняння з результатом ітераційного підходу. Отримані результати також використовуються для опису проблеми теплового потоку в багат шарових структурах, в яких слід враховувати не тільки тепловий опір всередині шарів, але й опір Капіці між шарами. Обговорюється практичне застосування отриманих результатів до одновимірних наноструктур та до квазіодновимірних теплопровідних систем, розглядаються різні граничні випадки та проводиться порівняння з експериментальними даними.

**Ключові слова:** квазічастинки, наноструктури, теплопередача, одновимірний рух, центри розсіювання.

## Аналитическое рассмотрение переноса частиц в одномерных наноструктурах

Я. Амрит, Т. Мединцева, К. Немченко, Т. Вихтинская

<sup>1</sup> LIMS-CNRS, Université Paris-Saclay, 91405, Orsay, France

<sup>2</sup> Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина, пл. Свободы 4, 61022, Харьков, Украина

В статье представлено аналитическое исследование одномерных потоков баллистических квазичастиц в присутствии центров рассеяния. Такая ситуация может реализоваться при очень низких температурах или в системах очень малых размеров – наноструктурах. Для описания такой ситуации используется подход теплопередачи излучением в модели

Казимира, в котором учитывается взаимодействие фононов с границами образцов, или, например, подход Ландауэра, где вводится понятие вероятности фононного перехода из начального состояния в конечное. В то же время существует промежуточный режим, когда средний свободный пробег фононов вследствие их взаимодействия между собой, сравнивается с размером образцов. На сегодняшний день описание этого режима остается достаточно сложной проблемой для теоретического или численного решения. В этой работе мы предлагаем вероятностный подход в модели Ландауэра для описания теплопередачи при одномерном баллистическом движении квазичастиц. В рамках теории случайных блужданий рассматривается модель последовательных центров рассеяния. В результате работы получено явное аналитическое выражение для зависимости потока квазичастиц от вероятности рассеяния и количества центров рассеяния. Для объяснения физического смысла полученного результата проводится сравнение с результатом итерационного подхода. Полученные результаты также используются для описания проблемы теплового потока в многослойных структурах, в которых следует учитывать не только тепловое сопротивление внутри слоев, но и сопротивление Капицы между слоями. Обсуждается практическое применение полученных результатов в одномерных наноструктурах и в квазиодномерных теплопроводящих системах, рассматриваются различные предельные случаи и проводится сравнение с экспериментальными данными.

**Ключевые слова:** квазичастицы, наноструктуры, теплопередача, одномерное движение, центры рассеяния.

The description of the thermal conductivity of crystals and quantum liquids in the phonon model is one of the achievements of physics. This model is based on the consideration of a system of strongly interacting atoms as a gas of weakly interacting thermal excitations – phonons. Using this approach, the dissipative properties of matter can be considered in the gas-kinetic model of a weakly nonideal phonon gas. In particular, it is possible to use the Boltzmann kinetic  $p+r=1$  equation. This equation is a rather complex integro-differential equation, which, in the general case, is non-linear. For the case of the state of the phonon system, which differs slightly from the existing quasilocal equilibrium state, the solution of the kinetic equations for phonon systems was carried out in the Callaway model. In another (opposite) case, a situation is possible when phonons do not interact with each other and their motion is ballistic. This situation is realized at very low temperatures or systems of very small sizes - nanostructures. To describe such a situation, the approach of heat transfer by radiation, which goes back to Casimir, is used, in which the interaction of phonons with image boundaries is taken into account, or, for example, the Landauer approach [1], where the probability of phonon transition from the initial state to the final state is introduced. At the same time, the intermediate regime, the mean free path of phonons due to their interaction with each other, is comparable to the size of the samples; to this day, it remains a rather difficult problem for a theoretical or numerical solution.

In this work, we use the probabilistic approach in the Landauer model to describe heat transfer in the one-dimensional ballistic motion of quasiparticles [2 – 4].

In the ballistic motion of phonon thermal conductance is determined by the type of reflection from the boundaries – diffuse or specular. In one-dimensional motion, these processes can be reduced to the concept of processes of passage of a conductor and the back reflection:

$$Q = Q_{\max} P, \quad (1)$$

where  $P$  is the probability of a phonon passing from a warm reservoir to a cold one. Maximum heat flux

$$Q_{\max} = K_0 \Delta T \quad (2)$$

which can flow through a one-dimensional channel is determined by the so-called quantum of thermal conductance, which for one phonon mode is equal to:

$$K_0 = k_B \frac{k_B T}{2\pi\hbar} \frac{\pi^2}{6} \quad (3)$$

Thus, the problem of calculating heat fluxes in such one-dimensional systems is reduced to determining the probability of passing through a one-dimensional channel that connects a warm reservoir with a cold one. In this case, it is assumed that the system contains a number  $N$  of defects (reflecting screens) for which the probability of transmission  $p$  and reflection  $r$  absorption of a phonon are determined. The sum of these values is equal to unity:

$$p + r = 1. \quad (4)$$

Now the coefficient  $P$  can be found by using the formalism of matrix eigenspace or by iterative formalism. In both these cases it has the following final form:

$$P = \frac{p(\lambda_+ - \lambda_-)}{\lambda_+^N (1 - p\lambda_-) - \lambda_-^N (1 - p\lambda_+)} \quad (5)$$

Here  $\lambda_{\pm}$  are the eigenvalues of matrix  $S$ :

$$\lambda_{\pm} = b \pm \sqrt{b^2 - 1} \quad (6)$$

Where

$$b = \frac{(p^2 - q^2) + 1}{2p}. \quad (7)$$

The obtained desired result (5) allows considering various limiting and special cases.

The simplest non-trivial case corresponds to the absence of absorption. In this case, the particles experience only reflections on the screens and the total particle flux is reserved:

$$Q_0 = Q_{out} + Q_{back} \quad (8)$$

In this case, from the general result (5), we obtain the following expression

$$P = \frac{p}{p + N(1-p)} \quad (9)$$

This result accounts multiple back scattering and may be used to explain the experimental data and to determine the parameters of the systems in the presence of a certain number of consecutive defects.

A rather interesting special case is obtained in the case of equiprobable forward and backward scattering, that is, in the case  $p = q = 1/2$ :

$$P = \frac{1}{N+1} \quad (10)$$

The main feature of the results (9) and (10) is the absence of characteristic exponential dependences on the number of defects and (or) on the length of the conductors, which are typical for ordinary absorption. Apparently, this is due to the fact that as a result, all possible trajectories of the particle's motion were taken into account and this result cannot be represented as a product of factors respecting to separate spatial parts of a conductor or a product of factors that correspond to successive time intervals. In other words, this process cannot be represented in the form of Markov chains, and is an example of a non-Markovian process. Thus, the model of radiative heat transfer with successive scattering centers and absorption considered in this article corresponds to a certain integral process with a certain integral equation. Strictly speaking, such integral equations were obtained and investigated in two-dimensional [5] nanostructures.

Another feature of the result (9), and even more so of the result (10), is their unexpected simplicity. It testifies, among other things, that this result may have a simple physical meaning or a mathematical derivation. Indeed, the results (9) and (10) can be obtained by the induction method starting from the case of one defect, when  $P(N = 1) = p$  (or the case of the absence of defects  $P(N = 0) = 1$ ) and the recurrence relation that connects  $P(N)$  and  $P(N - 1)$ :

$$P_N^{-1} = P_{N-1}^{-1} + \frac{1-p}{p}. \quad (11)$$

On the one hand, the solution of the recurrent equation (11) immediately gives the result (9). On the other hand,

this result allows us to pass to the notations of heat resistances in relations (1) and (2).

$$Q = \frac{1}{R_\Sigma} \Delta T \quad (12)$$

If we assume that the cells in the considered problem consist of different materials, then the probability forward scattering at the boundaries will be unambiguously related to Kapitza's resistance. In this case, the resistance of such a sample will be determined by the sum of the resistances:

$$R_\Sigma = R_{\min} + NR_K \quad (13)$$

Here  $R_{\min} = 1/K_0$  is the reciprocal of the quantum of heat conductance, and  $R_K$  is the Kapitza resistance for one-dimensional case:

$$R_K = \frac{1-p}{p} R_{\min} \quad (14)$$

The relations similar to (21) were used in [6] to describe the thermal properties of polycrystals.

Thus, the article proposes an original approach for calculating the phonon-induced heat flux in one-dimensional nanostructures. This approach is implemented within the framework of the theory of random walks in the presence of scattering centers. As a result, an explicit expression (5) was obtained for the probability of a phonon passing through a system consisting of a given number of defects with a known transmission coefficient. Limiting cases (9) and (10) of the general result are considered. The relationship between the obtained result and the results of other works is discussed.

### Acknowledgements

The authors express their sincere gratitude to Viktor Ilyich Verbitsky for his fruitful and valuable remarks made during the discussion of the results of the article.

### References/Literature

1. S.G. Das, A. Dhar, Eur. Phys. J. B, **85**, 372, (2012). <https://doi.org/10.1140/epjb/e2012-30640-x>
2. Y.Q. Liu, D. Tainoff, M. Boukhari, J. Richard, A. Barski, P. Bayle-Guillemaud, E. Hadji, O. Bourgeois, IOP Conf. Ser., Mater. Sci. Eng. **68**, 012005, (2014). <https://doi.org/10.1088/1757-899X/68/1/012005>
3. O. Bourgeois, D. Tainoff, A.Tavakoli, Y. Liu, C. Blanc, M. Boukhari, A. Barski, E. Hadji, C.R. Physique **17**, 1154, (2016). <https://doi.org/10.1016/j.crhy.2016.08.008>
4. D.L. Nika, A.I. Cocemasov, A.A. Balandin, Physics Review B, **88**, 035428, (2013). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.035428>
5. J. Amrit, K. Nemchenko, T. Vikhtynska, J. App. Physics **129**, 085105, (2021). <https://doi.org/10.1063/5.0036935>
6. J. Amrit J. Phys. D: Appl. Phys. **39**, 4472, (2006). <https://doi.org/10.1088/0022-3727/39/20/026>

## Властивості і можливості практичного застосування кристалу GaSe інтеркальованого $\beta$ -циклодекстрином допованого йодом

В. Максимич<sup>1</sup>, Д. Цалус<sup>2</sup>, Р. Швець<sup>1</sup>, П. Хабецькі<sup>2</sup>, І. Бордун<sup>1,2</sup>, Н. Покладок<sup>1</sup>,  
Ф. Іващишин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Інститут прикладної математики і фундаментальних наук, Національний університет „Львівська політехніка”, вул. Степана Бандери, 12, м. Львів, 79013, Україна

<sup>2</sup> Електротехнічний факультет, Ченстоховська Політехніка, просп. Армії Крайової 17, 42-200, Ченстохова, Польща  
vitalii.m.maksymych@ipm.ua

ORCID: 0000-0001-9199-8483, 0000-0003-4224-7020, 0000-0002-4887-3105, 0000-0003-4857-8904, 0000-0001-9386-4702, 0000-0002-6919-5841

DOI: 10.26565/2222-5617-2021-34-07

В роботі наведені результати досліджень клатратного комплексу із ієрархічною архітектурою конфігурації субгосподар-господар-гість. В експериментах матеріалом-господарем був напівпровідниковий монокристал селенід галію (GaSe), який володіє яскраво вираженою шаруватою структурою і може бути використаний як матриця із 2D гостьовими позиціями. Супрамолекулярним кавітаном виступав бетациклодекстрин ( $\beta$ -ЦД), який характеризується наявністю внутрішніх молекулярних порожнин, в які можуть бути впроваджені гостьові компоненти і може бути використаний як проміжний «господар». «Гостем» було обрано молекулярний йод ( $J_2$ ), який здатний утворювати комплекси за принципом замок-ключ із  $\beta$ -циклодекстрином. Формування клатрату GaSe- $\beta$ -ЦД- $J_2$  відбувалося за тристадійною інтеркаляційно-деінтеркаляційною технологією, в результаті якої, на третьому етапі цієї технологічної операції монокристал GaSe досягнув 5-кратного розширення. Дослідження електропровідних та поляризаційних властивостей отриманого клатрату проведені методом імпедансної спектроскопії в діапазоні частот  $10^{-3}$ - $10^6$  Гц за нормальних умов, за накладання постійного магнітного поля напруженістю 220 кА/м та за освітлення (імітатором сонячного випромінювання потужністю 65 Вт). Домішковий енергетичний спектр досліджено методом термостимульованого розряду. В результаті проведених досліджень синтезованого комплексу виявлено наступні явища: ефект «від'ємної ємності», магнеторезистивний ефект і магнето- та фото-діелектричний ефекти. Результати досліджень отриманого клатрату вказують на його можливе практичне застосування для виготовлення безгіраторних наноліній затримки, параметрами яких можна керувати постійним магнітним полем та світлом. А також, клатрат може бути використаний як високочутливий сенсор магнітного поля резистивного та ємнісного типу.

**Ключові слова:** клатрат, інтеркаляція, ієрархічна архітектура, система «господар-гість»

## Properties and possibilities of practical applications of GaSe crystal intercalated with $\beta$ -cyclodextrin doped with iodine

V. Maksymych<sup>1</sup>, Dariusz Calus<sup>2</sup>, R. Shvets<sup>1</sup>, P. Chabecki<sup>2</sup>, I. Bordun<sup>1,2</sup>, N. Pokladok<sup>1</sup>,  
F. Ivashchyshyn<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Institute of Applied Mathematics and Fundamental Sciences, Lviv Polytechnic National University, Bandera Str. 12, 79013 Lviv, Ukraine

<sup>2</sup> Faculty of Electrical Engineering, Czestochowa University of Technology, Al. Armii Krajowej 17, 42-200 Czestochowa, Poland

The clathrate complex of hierarchical architecture was successfully synthesised by the intercalation of beta-cyclodextrin ( $\beta$ -CD) and molecular iodine ( $J_2$ ) in between the layers of five-fold expanded matrix of gallium selenide (GaSe). The obtained clathrate was investigated by the impedance spectroscopy under normal conditions, at illumination and in the constant magnetic field and the character of clathrate response to the ac electric field was established. As a result of studies of the synthesized GaSe- $\beta$ -CD- $J_2$  complex the following phenomena were found: the effect of negative capacitance, magnetoresistivity effect and magnetodielectric and photodielectric effects. The research result of the obtained clathrate indicates its possible practical application for the creation of nongyration delay nanolines, the parameters of which can be controlled by a constant magnetic field and the light. The clathrate can also be used as a highly sensitive magnetic field sensor of resistive and capacitive type.

**Keywords:** clathrate, intercalation, hierarchical architecture, host-guest system.

## Свойства и возможности практического применения кристалла GaSe интеркальированного $\beta$ -циклодекстрином допированного йодом

В. Максимич<sup>1</sup>, Д. Цалус<sup>2</sup>, Р. Швець<sup>1</sup>, П. Хабецький<sup>2</sup>, И. Бордун<sup>1,2</sup>, Н. Покладок<sup>1</sup>,  
Ф. Иващишин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Інститут прикладної математики і фундаментальних наук, Національний університет „Львівська політехніка”, ул. Степана Бандери, 12, г. Львів, 79013, Україна

<sup>2</sup> Електротехнічний факультет, Ченстоховська Політехніка, просп. Армії Краєвої 17, 42-200, Ченстохова, Польща

В роботі приведені результати досліджень клатратного комплексу з ієрархічною архітектурою конфігурації субхозяїн <хозяїн <гость>>. В експериментах матеріалом-хозяїном був напівпровідниковий монокристал селенід галія (GaSe), який має виражену шарову структуру і може бути використаний як матриця з 2D гостьовими позиціями. Супрамолекулярним кавитандом виступав бета-циклодекстрин ( $\beta$ -ЦД), який характеризується наявністю внутрішніх молекулярних порожнин, в які можуть бути введені гостьові компоненти і може бути використаний як проміжний «хозяїн». «Гостем» був обраний молекулярний йод ( $J_2$ ), який здатний утворювати комплекси за принципом замка-ключа з  $\beta$ -циклодекстрином. Формування клатрату GaSe  $\langle\beta\text{-ЦД}\langle J_2\rangle\rangle$  відбувалося за тріестадійної інтеркаляційно-деінтеркаляційної технології, в результаті якої, на третьому етапі цієї технологічної операції монокристал GaSe досяг 5-кратного розширення. Дослідження електричних і поляризаційних властивостей отриманого клатрату проведені методом імпедансної спектроскопії в діапазоні частот  $10^{-3}$ – $10^6$  Гц при нормальних умовах, при накладенні постійного магнітного поля напруженістю 220 кА/м і при освітленні (імітатором сонячного випромінювання потужністю 65 Вт). Примісний енергетичний спектр досліджений методом термостимульованого розряду. В результаті проведених досліджень синтезованого комплексу виявлені наступні явища: ефект «отрицательной ємкості», магнеторезистивний ефект і магнето- і фото-діелектричні ефекти. Результати досліджень отриманого клатрату вказують на його можливе практичне застосування для виготовлення безгіраторних наноліній задержки, параметрами яких можна керувати постійним магнітним полем і світлом. А також, клатрат може бути використаний як високочутливий сенсор магнітного поля резистивного і ємкостного типу.

**Ключевые слова:** клатрат, інтеркаляція, ієрархічна архітектура, система «хозяїн-гость».

### Вступ

Сучасний розвиток нанотехнологій і нанопристроїв вивів на чільне місце задачу створення нових функціональних матеріалів і наносистем на їх основі. Метод інтеркаляції, застосований до синтезу гетероструктурованих матеріалів дозволяє створювати супрамолекулярні комплекси за принципом замка-ключа, за яким зв'язок між господарем та гостем характеризується слабкою взаємодією, що дозволяє зберегти ідентичність їх властивостей [1-3].

Побудова клатратів із ієрархічною будовою супрамолекулярних ансамблів субгосподар<господар<гість>> дозволяє формувати неорганічно/органічні структури, які би володіли потрібною функціональною гібридністю. Так в недавніх синтезованих нами клатратах за кімнатних температур і в слабких магнітних полях виявлено колосальний магнеторезистивний та магнітоємнісний ефекти [4,5], явище від'ємної ємкості та можливість накопичення електричної енергії на квантовому рівні [6,7].

### Результати та їх обговорення

На рис. 1 наведені частотні залежності дійсної складової питомого імпедансу ( $ReZ(\omega)$ ), виміряні в напрямку кристалографічної осі  $C$  5-кратно розширеного монокристалу GaSe та клатрату GaSe $\langle\beta\text{-ЦД}\langle J_2\rangle\rangle$  сформованого на його основі. Із представлених залежностей  $ReZ(\omega)$  виміряних за нормальних умов для обох досліджуваних зразків можемо зробити висновок, що впровадження

гостьового компоненту не призводить до помітних змін реальної частини комплексного питомого опору, так як значення і сам характер поведінки залежності залишається практично без змін (крива 1 та 2 на рис. 1).

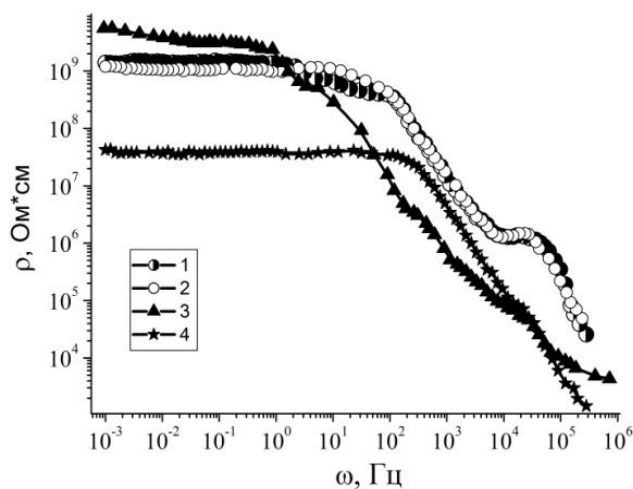


Рис. 1. Частотні залежності дійсної складової питомого імпедансу для клатрату GaSe $\langle\beta\text{-ЦД}\langle J_2\rangle\rangle$ , виміряні за нормальних умов (2), в магнітному полі (3) та при освітленні (4). (1) – 5-кратно розширена матриця GaSe.

Як для вихідної 5-кратно розширеної матриці GaSe так і для клатрату GaSe $\langle\beta\text{-ЦД}\langle J_2\rangle\rangle$  залежність  $ReZ(\omega)$  веде себе звичайним чином: квазігоризонтальна низькочастотна вітка переходить у внизспадаючу при вищих частотах за рахунок вкладу перескоків носіїв



заряду по локалізованих станах поблизу рівня Фермі, або процесів збудження-захоплення їх у хвості зон чи в зони делокалізованих станів.

Дія постійного магнітного поля (крива 3 на рис.1) призводить до виникнення в частотному діапазоні  $10^{-3} \div 1$  Гц додатного магніторезистивного ефекту, а в частотному діапазоні  $1 \div 10^6$  Гц – від’ємного магніторезистивного, чого не спостерігається для вихідної 5-кратно розширеної матриці *GaSe*. Даний ефект, найімовірніше, викликаний зеєманівським перерозподілом станів електронної підсистеми, як було показано раніше в роботі [8].

Вплив світла, очікувано, призводить до значного зменшення реальної частини комплексного опору за рахунок фоточутливості напівпровідникової матриці *GaSe*. Впровадження супрамолекулярного кавітату  $\beta$ -ЦД $\langle J_2 \rangle$  не призводить до помітного зростання фоточутливості клатрату *GaSe* $\langle \beta$ -ЦД $\langle J_2 \rangle$  $\rangle$ , вона залишається практично на тому ж рівні, що і для 5-кратно розширеної матриці *GaSe*, і становить  $\rho_D/\rho_L \approx 31.6$  рази. Такий результат свідчить про переважаючий вклад в фотоелектропровідність виключно субгосподаря – 5-кратно розширеної матриці *GaSe*.

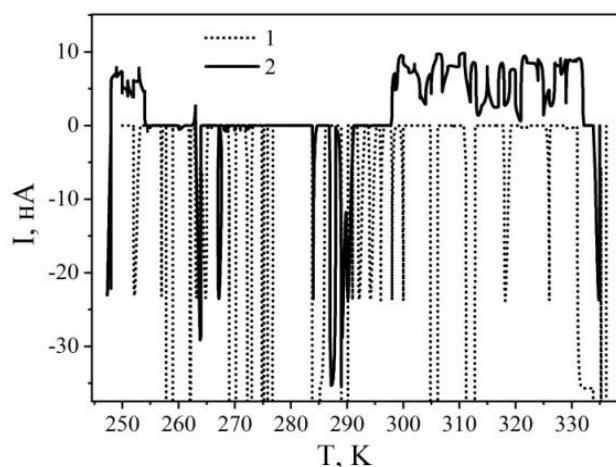


Рис. 2. Струми термостимульованого розряду виміряні для 5-кратно розширеної матриці *GaSe* (1) та клатрату *GaSe* $\langle \beta$ -ЦД $\langle J_2 \rangle$  $\rangle$  (2).

З метою більш детального дослідження структури домішкового енергетичного спектру досліджуваного клатрату *GaSe* $\langle \beta$ -ЦД $\langle J_2 \rangle$  $\rangle$  були виміряні спектри термостимульованого розряду (рис.2). У випадку вихідної 5-кратно розширеної матриці *GaSe* спостерігаємо мінізонний характер енергетичного спектру із глибокими пастковими центрами, що характерно для розширених кристалів *GaSe*. В цьому випадку відбувається релаксація гомозаряду, зумовлена інжекцією носіїв заряду та їх локалізацією

на центрах прилипання. Після формування нанопрошарку  $\langle \beta$ -ЦД $\langle J_2 \rangle$  $\rangle$  між шарами *GaSe* спектр набуває квазінеперервного характеру у двох температурних інтервалах  $248 \div 252$  та  $298 \div 332$ , а релаксація відбувається гетерозаряду, зумовлена перерозподілом носіїв заряду між напівпровідниковою матрицею та гостьовим компонентом таким чином, що сусідні пари різних фаз будуть заряджатися зарядом протилежного знаку і їх можна тоді розглядати як диполі.

## Висновки

1. Досліджуваний клатрат *GaSe* $\langle \beta$ -ЦД $\langle J_2 \rangle$  $\rangle$  проявляє індуктивну поведінку в середньо- та високочастотній області спектру. Він може бути використаний для створення безгіраторних нанорозмірних ліній затримки, які будуть безпосередньо інкорпоровані в структуру пристроїв мікро- та наноелектроніки, а керування величиною індуктивності в даній структурі магнітним полем відкриває можливість створення нового типу магнетокерованих ліній затримки.

2. Для клатрату *GaSe* $\langle \beta$ -ЦД $\langle J_2 \rangle$  $\rangle$  зареєстровано в частотному діапазоні  $10^{-3} \div 1$  Гц додатний магніторезистивний ефект значення якого досягає  $\rho_H/\rho_0 = 4,6$  рази, а в частотному діапазоні  $1 \div 10^6$  Гц – від’ємний магніторезистивний ефект значення якого досягає  $\rho_0/\rho_H = 50$  раз та магнетодіелектричний ефект в частотному діапазоні  $300 \div 10^6$  Гц значення якого досягає  $\epsilon_H/\epsilon_0 = 300$  раз, при цьому тангенс кута електричних втрат приймає значення набагато менші одиниці. Відповідний клатрат може бути використаний в технології виготовлення високочутливих сенсорів магнітного поля як резистивного так і ємнісного типу.

## References

1. V. Ramamurthy, B. Mondal. J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev., **23**, 68-102 (2015).
2. D. B. Amabilino, D. K. Smith, J. W. Steed. Chem. Soc. Rev., **46**, 2404-2420 (2017). <https://doi.org/10.1039/C7CS00163K>
3. P. Hashim, J. Bergueiro, E. Meijer, T. Aida. Prog. Polym. Sci., **105**, 101250 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2020.101250>
4. P. Chabecki, D. Calus, F. Ivashchysyn, A. Pidluzhna, O. Hryhorchak, I. Bordun, O. Makarchuk, A. Kityk. Energies. **13** (17), 4321(1-16), (2020). <https://doi.org/10.3390/en13174321>
5. I. Grygorchak, D. Calus, A. Pidluzhna, F. Ivashchysyn, O. Hryhorchak, P. Chabecki, R. Shvets. Applied Nanoscience, **10**, 4725-4731, (2020). <https://doi.org/10.1007/s13204-020-01447-2>
6. T. Poplawski, A. Pidluzhna, F. Ivashchysyn, P. Chabecki, R. Shvets. Journal of Nano- and Electronic Physics., **11** (6), 06023 (1-5), (2019).
7. F. Ivashchysyn, A. Pidluzhna, D Calus, O. Hryhorchak, P.

Chabecki, O. Makarchuk. Bulletin of the Polish Academy of Sciences: Technical Sciences. **69** (2), (2021).

8. M. H. Weiler, W. Zawadzki, B. Lax. Phys. Rev. **163**, 733, (1967). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.163.733>

PACS:

UDC:

## The influence of copper on zinc oxide properties – a review

E. Chłopocka, E. Nowak

<sup>1</sup> Faculty of Materials Engineering and Technical Physics, Poznan University of Technology, Poland  
ewelina.k.nowak@doctorate.put.poznan.pl

ORCID:

DOI: 10.26565/2222-5617-2021-34-08

ZnO has been experiencing a research renaissance for several years due to its promising electronics and gas sensing properties. It has a relatively big  $E_g = 3.37$  eV at room temperature, a considerable exciton binding energy (60 meV), and exhibits n-type conductivity. One of the most significant advantages of ZnO is its ability to fine-tuning the conductivity and forbidden energy with doping.

Doping with transition metals can enhance zinc oxide's physical, chemical, and optical properties. One such material is copper, which seems to be an interesting dopant due to its high electric conductivity and similar ionic radii. The possibility of achieving the half-metallic ferromagnetism, p-type conductivity, or shifting the luminescence edge to the blue region seems to be an exciting feature for modern electronics. What is more, Cu doping may increase the thermal resistivity, which can be applied as the material in high-power devices.

The following article consists of a detailed review of studies of copper doped ZnO. The first part of the paper consists of a deep look into the properties of ZnO and the purpose of copper doping of ZnO structures. Due to a wide variety of synthesis methods, the second part consists of studies on the production methods of such structures. The central part of an article is correlated with the studies on structural and optical characterization of Cu doped ZnO; thus, the main body of this paper is divided into three sections. For crystal structure, we derive the analysis of XRD patterns, which gives information on the sub-phases, which may form due to doping. In addition, UV-Vis absorption gives insight into the new material's band structure. Finally, a short section about photoluminescence brings attention to potential applications in LED diodes.

**Keywords:** crystal structure, doping, photoluminescence.

## Вплив міді на властивості оксиду цинку – огляд

Edyta Chłopocka, Ewelina Nowak

Faculty of Materials Engineering and Technical Physics, Poznan University of Technology, Poland

ZnO переживає дослідницький ренесанс протягом декількох років завдяки своїм перспективним властивостям в області електроніки та газодетектування. Він має відносно велику  $E_g = 3,37$  eV при кімнатній температурі, значну енергію зв'язку екситону (60 meV) і провідність n-типу. Однією з найважливіших переваг ZnO є його здатність точно регулювати провідність та заборонену енергію за допомогою допювання.

Допювання у перехідних металах може посилити фізичні, хімічні та оптичні властивості оксиду цинку. Одним з таких матеріалів є мідь, що виявляється цікавою добавкою завдяки своїй високій електропровідності та подібним іонним радіусам. Можливість досягнення напівметалевого феромагнетизму, провідності p-типу або зміщення краю люмінесценції в область синього спектру виявляється цікавою особливістю для сучасної електроніки. Більш того, допювання Cu може збільшити тепловий опір, тоді мідь можна застосовувати як матеріал для надпотужних пристроїв.

Ця робота складається з детального огляду досліджень ZnO, допійованого міддю. Перша частина статті складається з глибокого вивчення властивостей ZnO та доцільності допювання міддю структур з ZnO. Завдяки широкому розмаїттю методів синтезу друга частина складається з досліджень методів виробництва таких структур. Центральна частина статті співвідноситься з дослідженнями структурної та оптичної характеристики ZnO, допійованого Cu; таким чином, основна частина цього документу розділена на три розділи. Для кристалічної структури отримано аналіз зразків рентгенограми, який дає інформацію про субфази, що можуть утворитися внаслідок допювання. Крім того поглинання у ультрафіолетовому та видимому діапазонах дає змогу зрозуміти зонну структуру нового матеріалу. Нарешті, короткий розділ про фотолюмінесценцію звертає увагу на потенційні можливості використання у світлодіодах.

**Ключові слова:** кристалічна структура, легування, фотолюмінесценція.

## Влияние меди на свойства оксида цинка – обзор

Edyta Chłopocka, Ewelina Nowak

Faculty of Materials Engineering and Technical Physics, Poznan University of Technology, Poland

ZnO переживает исследовательский ренессанс в течение нескольких лет благодаря своим перспективным свойствам в области электроники и газодетекции. Он имеет относительно большую  $E_g = 3,37$  эВ при комнатной температуре, значительную энергию связи экситона (60 мэВ) и проводимость n-типа. Одним из важнейших преимуществ ZnO является его способность точно регулировать проводимость и запрещенную энергию с помощью допирования.

Допирование в переходных металлах может усилить физические, химические и оптические свойства оксида цинка. Одним из таких материалов является медь, которая оказывается интересной добавкой благодаря своей высокой электропроводности и подобным ионным радиусам. Возможность достижения полуметаллического ферромагнетизма, проводимости p-типа или смещения края люминесценции в область синего спектра оказывается интересной особенностью для современной электроники. Более того, допирование Cu может увеличить тепловое сопротивление, тогда медь можно применять в качестве материала для сверхмощных устройств.

Эта работа состоит из детального обзора исследований ZnO, допированного медью. Первая часть статьи состоит из глубокого изучения свойств ZnO и целесообразности допирования медью структур с ZnO. Благодаря широкому разнообразию методов синтеза вторая часть состоит из исследований методов производства таких структур. Центральная часть статьи соотносится с исследованиями структурной и оптической характеристики ZnO, допированных Cu; таким образом, основная часть этого документа разделена на три раздела. Для кристаллической структуры получен анализ образцов рентгенограммы, который дает информацию о субфазах, которые могут образоваться в результате допирования. Кроме того, поглощение в ультрафиолетовом и видимом диапазонах позволяет понять зонную структуру нового материала. Наконец, короткий раздел о фотолюминесценции обращает внимание на потенциальные возможности использования в светодиодах.

**Ключевые слова:** кристаллическая структура, легирование, фотолюминесценция.

## 1. Introduction

ZnO is a widely researched material for multiple applications. It is an II-VI compound semiconductor, which due to its native defects, exhibits n-type conductivity. Material has a wide bandgap equal to 3.37 eV and large exciton binding energy (60 meV). Good transparency over a wide range of wavelengths makes it an attractive material for flexible, transparent electronics. ZnO has high electron mobility, exhibits strong photoluminescence at room temperature, and is chemically and thermally stable. The lack of rare earth elements and toxic environmental pollutants makes it an inexpensive and easily disposable material [1]. On top of that, ZnO has piezoelectric properties due to the hexagonal wurtzite structure [2].

Applications of zinc oxide include photocatalysis, solar cells, UV protectors, and gas sensing devices. Moreover, the semiconductor is also considered a potential material candidate for piezoelectric devices [2-3]. ZnO can be found in surface acoustic wave devices, varistors, planar optical waveguides, and ultraviolet photodetectors [3]. Zinc oxide nanoparticles have good biocompatibility to human cells and have been used in the treatment of cancer [1]. From all of the above, gas sensing is incredibly widely researched. ZnO is an n-type semiconductor and, as such, can be used in MOS devices. ZnO can be used as CO [3-5], ethanol [6], and acetone vapor sensor [7].

Doping with transition metals can enhance zinc oxide's physical, chemical, and optical properties. Copper sparks interest as a ZnO dopant due to its high electric conductivity and similar ionic radii [2]. The Cu-doped ZnO exhibits half-metallic ferromagnetism [8]. Cu has been known to cause ZnO emission in the light-blue range when used as a dopant. Cu doping can change the conductivity and visible luminescence in connection with Cu [9].

This paper is an overview of the influence of copper doping on zinc oxide. We undertook this study to bring experimental results from researchers and compare their findings with each other and first-principle calculations [4].

## 2. Synthesis

На рис. 1 наведені частотні залежності дійсної складової комплексного питомого імпедансу ( $ReZ(\omega)$ ), виміряні в напрямку кристалографічної осі  $C$  5-кратного розширеного Cu doped ZnO can be obtained in a variety of methods. Due to the ease of synthesis, one of the most often chosen synthesis methods is the sol-gel process. The technique allows elaborating a solid material from a solution using a sol or a gel as an intermediate step and at much lower temperatures than traditional preparation methods. The synthesis of solid materials with a sol-gel way often involves wet chemistry reactions and sol-gel chemistry based on the transformation of molecular precursors into an oxide network by hydrolysis and condensation reactions [10]. Due to its advantages, the method was used for the synthesis of Cu-doped ZnO powders [11], thin solid [12], and nanocrystalline [13] films, as well as nanoparticles [7, 14, 15].

Another inexpensive method is the chemical co-precipitation method. Co-precipitation is a phenomenon in which the fractional precipitation of an ion in a solution results in the precipitation of other ions in the solution [16]. In addition, it does not require a high process temperature and is environmentally friendly [2]. This method was used in the synthesis of Cu-doped ZnO nanoparticles [1-3, 16].

Another approach to obtaining doped zinc oxide thin films is the spray pyrolysis technique [5, 6]. In this method of thin-film preparation solution is sprayed on a heated surface, where the constituents react to form a chemical compound.

In many studies, synthesis of Cu-doped ZnO required vacuum. There are reports of thin films deposited by co-sputtering using ZnO and Cu targets [4], pulsed laser deposition [17] and electron beam techniques [17].

### 3. Crystal structure

Under normal conditions, non-doped ZnO crystallizes in the wurtzite structure with a hexagonal cell; the space symmetry group is (P63mc). Each zinc atom is surrounded by four oxygen atoms located at the corners of a nearly regular tetrahedron [18]. Wurtzite zinc oxide has a hexagonal structure (space group C6mc) with lattice parameters  $a = 0.3296$  and  $c = 0.52065$  nm [19]. The tetrahedral coordination in ZnO results in non-central symmetric structure and consequently piezoelectricity and pyroelectricity. Another important characteristic of ZnO is polar surfaces - the oppositely charged ions produce positively charged Zn-(0001) and negatively charged O-(0001) surfaces, resulting in a normal dipole moment and spontaneous polarization along the c-axis [19]. Many particular features of ZnO are determined by the fact that among the elements of the sixth group, the ionization energy of oxygen is the highest, which leads to a strong interaction between the Zn3d and O2p orbitals [18].

For the influence of Cu doping on ZnO structure, XRD is one of the most used techniques. The crystalline nature of Cu doped ZnO is identical to pure ZnO, even in cases of significant doping in [4], where the atomic ratio of Cu/Zn was as high as 0.38. The peaks can be found around  $31.78^\circ$ ,  $34.43^\circ$ ,  $36.25^\circ$ ,  $47.57^\circ$ ,  $56.63^\circ$  and  $62.89^\circ$  which correspond to the Miller Indices (1 0 0), (0 0 2), (1 0 1), (1 0 2), (1 1 0) and (1 0 3) [2]. Usually [1-3, 7, 14, 16], the most prominent is the (1 0 1) plane except for study [4], where the thin film had a dominant (002) peak. There are no clear humps that can be unambiguously identified as copper or copper oxides in all cases. It can be concluded that copper is being incorporated into the zinc lattice site rather than at the interstitial position. It is possible and predictable because Cu has similar ionic radii to Zn.

Lattice parameters are stable and equal to about  $3.25 \text{ \AA}$  for a and b constants and  $5.20 \text{ \AA}$  for c constants [1, 2, 20]. Furthermore, [1] explains that the little change in a and c constants does not change the a/c ratio significantly, which stays at  $1.60 \text{ \AA}$ . What does change is the crystalline size in studies on nanoparticles. In [1], crystalline is getting bigger with the increasing content of copper. After further reading, in [2], the grain size is getting minor upon doping under 5% Cu, similar to [16]. Copper concentration above 5% caused the grain size to increase again. These three studies obtained their samples through the chemical co-precipitation method, the only difference being used chemicals.

### 4. UV-Vis absorption

Researchers agree that Cu doping decreases the optical energy bandgap [1, 2, 20]. Change towards lower energy is to be expected when considering the Cu bulk material band gap equal to 1.4 eV [21]. There can be exceptions to this, for example, being [21] work, where the bandgap increases significantly in Cu doped nanocrystals. The author underlines that this change is anomalous and links it to second-order perturbation theory, which may be more prominent in nanocrystals. On the other hand, it confirms the uniform substitution of Cu ions in the ZnO lattice, as explained in works of [22]. First-principle calculations show that the energy gap can be decreased as much as 0.15 eV by just 6% doping [20]. In the experiment, the most prominent example is [2]'s work, where the bandgap dropped to 2.94eV with 7% wt doping. In comparison, the bandgap in [1]'s study has only decreased to 3.28 eV at 10% doping which shows that lowering the bandgap is not trivial. As mentioned earlier, the crystalline structure is almost identical to that of ZnO. Drop-in bandgap originates not from the structure but many effects taking place like the p-d spin-exchange interactions between the band electrons and the localized d electrons of the transition-metal ion substituting the Cu<sup>2+</sup> ion., strong p-d mixing of O and Cu, and many-body effects on the conduction and valence bands. Many-body effects shrink the bandgap, which originates from electron interaction and impurity scattering; It has been attributed to the merging of an impurity band into the conduction band and, in the process shrinking the bandgap [2].

### 5. Photoluminescence

The effects of Cu doping can be seen in PL spectra. ZnO has one peak in the UV region and one in the visible region. Cu doping results in increasing PL intensity of visible region peaks and decreasing UV region peaks simultaneously. An increase in visible region intensity can be linked to defects such as oxygen and zinc vacancies being more prominent in higher doped ZnO [2]. Characteristic green band emission has been reported in numerous articles like [2] and [17]. The latter work is exciting due to the phenomena of green or blue-emitting Cu-doped ZnO depending on the method of fabrication and temperature of annealing. Furthermore, a redshift of spectra has been observed. It is in agreement with previous findings of change in electronic structure; impurity states are created below the conduction band [2].

### 6. Conclusions

Copper doping enhances ZnO properties. It is the most prominent in PL studies, where copper doping increases light emitted in the visible spectrum. Cu-doped ZnO is a promising material for cost-effective blue, green, and white LED [17].

There is a considerable amount of studies being done on improving gas-sensing properties of ZnO by Cu doping. It has been shown that Cu adsorption is promoted at the Cu sites [4]. Furthermore, copper doping allows zinc oxide to detect ethanol vapors [6], H<sub>2</sub>, and LPG [3]. UV light illumination on samples caused the detection of acetone and ethanol at room temperature [7]. Studies experimenting with the percentage of doping material and fabrication of samples show that there is much potential in the gas-sensing capabilities of this material.

It is worth mentioning that Cu doping allows keeping the well-known hexagonal wurtzite structure of zinc oxide and at the same time make the material more resistant to high temperatures [1] and lowers its bandgap [1, 2, 20]. First-principle calculations show that introducing copper into the ZnO structure may lead to p-doping [20]. Thus the investigation of the ZnO doped with copper may help create ZnO-based junctions.

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Poland, grant no. 0511/SBAD/0018

### References

1. Chithra M. J., Pushpanathan K., Modern Physics Letters B (2016), 30 <https://doi.org/10.1142/S0217984916504066>
2. Sajjad M., et al., Results in Physics, (2018) 9, p. 1301-1309 <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2018.04.010>
3. Sonawane Y. S., et al., Materials Research Bulletin (2008) 43, p. 2719-2726 <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2007.10.014>
4. Gong H., et al., Sensors and Actuators B: Chemical (2006) 115, s. 247-251 <https://doi.org/10.1016/j.snb.2005.09.008>
5. Gonzalez-Vidal J. L., Revista Mexicana de Fisica, (2006), 52
6. Paraguay F., Miki-Yoshida M., Superficies y Vacio, (1999), 9, s. 245
7. Peng L., et al., Sensors and Actuators B (2008), 131, s. 660-664 <https://doi.org/10.1016/j.snb.2007.12.060>
8. Ye, L. H., et al., Physical Review B (2006), 73(3), 73-76. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.081304>
9. Hausmann, et al. Zeitschrift Für Physik B Condensed Matter (1980) 40, 1. <https://doi.org/10.1007/BF01295062>
10. Znaidi, L., Materials Science and Engineering B (2010), 174, 18-30 <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2010.07.001>
11. Liu, H.; et al., Applied Surface Science (2010), 256, 4162-4165, <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2010.01.118>
12. Banu Bahşi, Z.; Oral, AY, Optical Materials (2007), 29, 672-678, <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2005.11.016>
13. Tamil Illakkiya, J, et al., Emerging Materials Research (2016), 5, 57-61, <https://doi.org/10.1680/jemmr.15.00022>
14. Fernandes D. M., et al., Materials Chemistry and Physics, (2009), 115, s. 110-115 <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2008.11.038>
15. Udayabhaskar, R.; Karthikeyan, B., Journal of Applied Physics (2014), 115, 1-8, <https://doi.org/10.1063/1.4870447>
16. Muthukumaran, S., et al., Optical Materials (2012), 34(11), 1946-1953. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2012.06.004>
17. Allabergenov B., et al., Optical Materials Express (2013), 3, s. 1733-1741 <https://doi.org/10.1364/OME.3.001733>
18. Rodnyi, P.A., et al., Optics and Spectroscopy (2011), 111, 776-785, <https://doi.org/10.1134/S0030400X11120216>
19. Wang, Z.L., Journal of Physics Condensed Matter (2004), 16, 829-858 <https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/23/R02>
20. Ferhat M., et al., Appl. Phys. Lett. (2009), 94, 142502 <https://doi.org/10.1063/1.3112603>
21. Viswanatha R., et al., J. Phys. Chem. B (2006), 110, 45, 22310-22312 <https://doi.org/10.1021/jp065384f>
22. R.B. Bylisma, et al, Phys. Rev. B (1986, 33 8207. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.8207>

## Regular and stochastic dynamics of the Duffing oscillator excited by the harmonic force

P.K. Sikorski, I.O. Anisimov

*Taras Shevchenko National University of Kyiv, 60 Volodymyrska St., 01033, Kyiv, Ukraine  
sikorskiphilipp@knu.ua*

ORCID: 0000-0002-9764-259X, 0000-0002-6185-1162

DOI: 10.26565/2222-5617-2021-34-09

Regular and stochastic motion of the conservative oscillator with the cubic nonlinearity due to the external harmonic force (Duffing model) was analyzed numerically. This model corresponds to a wide class of real systems: oscillating circuit with nonlinear capacitance, forced oscillations of mathematical pendulum, the electron's motion in a crystal and others. Duffing equation can be transformed into Ueda equation, that depends only on two parameters – normalized magnitude and normalized frequency of the external force. Oscillation plots, 3D phase portraits, spectra and point mapping for various parameters and initial conditions were obtained.

Regular motion corresponds to phase oscillations around points of nonlinear resonances. Phase oscillation are non-isochronous due to the Duffing oscillator nonlinearity. These results can be interpreted in the terms of Kolmogorov – Arnold – Moser and Poincare – Birkhoff theorems. Sequence of the alternation of higher-order resonances on the point mapping is determined by the free oscillations' law of non-isochronism.

Stochastic motion was detected via continuous spectrum and irregular character of the point mapping. Stochastic motion appears in the vicinity of the phase oscillations' separatrices and can be associated with the heteroclinic structure formation. For this case irregular jumps between different parts of the separatrix can be clearly observed at the oscillation plots. Another case of the stochastic motion is the nonlinear resonances' overlapping according to Chirikov criterion (for larger amplitudes of the external force). Initial stage of the overlapping of several resonances was observed when stability areas remained substantial. Oscillation plot for this mode becomes more complicated. Further increase in the amplitude of the external force leads to the formation of the wide area of the stochastic motion (stochastic sea) with small islands of stability on the mapping.

**Key words:** Duffing oscillator, nonlinear resonance, stochastic dynamics

## Регулярна та стохастична динаміка осцилятора Дюффінга, збудженого гармонічною силою

Ф.К. Сікорський, І.О. Анісімов

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Володимирська 64, 01033, Київ, Україна*

Числовими методами проаналізовано регулярні та стохастичні коливання консервативного осцилятора з кубічною нелінійністю під дією зовнішньої гармонічної сили (модель Дюффінга). Ця модель відповідає широкому класу реальних систем: коливний контур із нелінійною ємністю, вимушені коливання математичного маятника, рух електрона в кристалі та інші. Рівняння Дюффінга може бути перетворене на рівняння Уеди, яке залежить тільки від двох параметрів – нормованої амплітуди та нормованої частоти зовнішньої сили. Було побудовано епюри коливань, тривимірні фазові портрети, спектри і карти точкових відображень для різних параметрів та початкових умов.

Регулярний рух відповідає фазовим коливанням навколо точок нелінійних резонансів. Фазові коливання є неізохронними внаслідок нелінійності осцилятора Дюффінга. Ці результати можуть бути інтерпретовані в термінах теорем Колмогорова – Арнольда – Мозера та Пуанкаре – Біркгофа. Послідовність чергування резонансів вищих порядків на карті точкових відображень визначається законом неізохронності власних коливань.

Стохастичний рух визначався за неперервним спектром та нерегулярним характером точкових відображень. Стохастичний рух виникає в околі сепаратрис фазових коливань і може бути пов'язаний із формуванням гетероклінічних структур. Для цього випадку нерегулярні стрибки між різними частинами сепаратриси можна чітко спостерігати на епюрах коливань. Інший випадок стохастичного руху – це перекриття нелінійних резонансів відповідно до критерію Чірікова (за більших амплітуд зовнішньої сили). Спостерігалася початкова стадія перекриття кількох резонансів, коли області регулярного руху залишалися значними. Епюри коливань у цьому випадку помітно ускладнюються. Подальше зростання амплітуди зовнішньої сили веде до утворення широкої області стохастичного руху (стохастичного моря) з маленькими острівцями стійкості на карті відображення.

**Ключові слова:** осцилятор Дюффінга, нелінійний резонанс, стохастична динаміка

# Регулярная и стохастическая динамика осциллятора Дюффинга, возбуждаемого гармонической силой

Ф.К. Сикорский, И.А. Анисимов

Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Владимирская 64, 01033, Киев, Украина

Численно проанализированы регулярные и стохастические колебания консервативного осциллятора с кубической нелинейностью под действием внешней гармонической силы (модель Дюффинга). Эта модель соответствует широкому классу реальных систем: колебательный контур с нелинейной емкостью, вынужденные колебания математического маятника, движение электрона в кристалле и другие. Уравнение Дюффинга может быть преобразовано в уравнение Уэды, зависящее только от двух параметров – нормированной амплитуды и нормированной частоты внешней силы. Были построены эпюры колебаний, трехмерные фазовые портреты, спектры и карты точечных отображений для разных параметров и начальных условий.

Регулярное движение соответствует фазовым колебаниям вокруг точек нелинейных резонансов. Фазовые колебания являются неизохронными вследствие нелинейности осциллятора Дюффинга. Эти результаты могут быть интерпретированы в терминах теорем Колмогорова – Арнольда – Мозера и Пуанкаре – Биркгофа. Последовательность чередования резонансов высших порядков на карте точечных отображений определяется законом неизохронности собственных колебаний.

Стохастическое движение определялось по непрерывному спектру и по нерегулярному характеру точечных отображений. Стохастическое движение возникает в окрестностях сепаратрис фазовых колебаний и может быть связано с формированием гетероклинических структур. Для этого случая нерегулярные скачки между разными частями сепаратрисы можно четко наблюдать на эпюрах колебаний. Другой случай стохастического движения – это перекрытие нелинейных резонансов в соответствии с критерием Чирикова (при больших амплитудах внешней силы). Наблюдалась начальная стадия перекрытия нескольких резонансов, когда области регулярного движения оставались существенными. Эпюры колебаний в этом случае заметно усложняются. Дальнейшее возрастание амплитуды внешней силы ведет к образованию широкой области стохастического движения (стохастического моря) с маленькими островками устойчивости на карте отображения.

**Ключевые слова:** осциллятор Дюффинга, нелинейный резонанс, стохастическая динамика

## Introduction

Oscillator with cubic nonlinearity (Duffing model) under the action of an external harmonic force is one of the simplest models that demonstrate stochastic dynamics. This model corresponds to a wide class of real systems: oscillating circuit with nonlinear capacitance, forced oscillations of mathematical pendulum, the electron's motion in a crystal and others. Although such models have long been being studied in the literature (see, e.g., [1]), conditions of the unpredictable behavior emergence and features of this behavior remain unclear. This report studies different modes of the conservative oscillator with cubic nonlinearity under the action of an external harmonic force, including the clarification of the conditions of the stochastic oscillations' occurrence.

## Model description and methods of analysis

The Duffing model (for the conservative case) is described by the equation

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \beta x^3 = f_m \cos pt, \quad (1)$$

where  $\omega_0$  is the frequency of free oscillations of the small amplitude,  $\beta$  is parameter of the cubic nonlinearity (we treat only the case  $\beta > 0$ ),  $f_m$  and  $p$  are amplitude and frequency of the external force, respectively. In the transition to dimensionless variables  $\tau = \omega_0 t$ ,  $y = x\sqrt{\beta}/\omega_0$  (1) takes the form of the so-called Ueda equation

$$\ddot{y} + y + y^3 = F \cos \Omega \tau, \quad (2)$$

that depends on only two parameters  $F = f_m \sqrt{\beta}/\omega_0^3$ ,  $\Omega = \omega_0/p$ .

Equation (2) was solved numerically using a package Wolfram Mathematica 12.0. Oscillation plots  $y(\tau)$ , phase portraits in coordinates  $(y, \dot{y}, \tau)$ , spectra (Fourier transforms of functions  $y(\tau)$ ), and point mappings were obtained. To construct the mappings, 3D phase trajectory was intersected by planes  $t = const$  (over a period of external force), and then the points of intersection were projected onto the plane  $(y, \dot{y})$  [2].

## Regular oscillations

Fig. 1 shows a point mapping for various initial conditions for a small external force ( $F = 1$ ).

In this case the mapping is similar to the phase portrait of free oscillations, that looks like a set of nested deformed ellipses. Only for the most noticeable resonances – at the frequency of the external force, at its one third and one half – the splitting of elliptical trajectories into chains of the separatrix loops is observed.

This effect becomes clear if one remembers that square of the oscillations' amplitude in the point mapping is proportional to intensity. Intensity for weakly nonlinear oscillations is proportional to the action (in the variables action - angle) Then the splitting of elliptical trajectories in fig. 1 can be interpreted as analogue of the resonant tori



destruction under the action of a non-integrated term in the Hamiltonian according to the Kolmogorov-Arnold-Moser and Poincare-Birkhoff theorems [3].

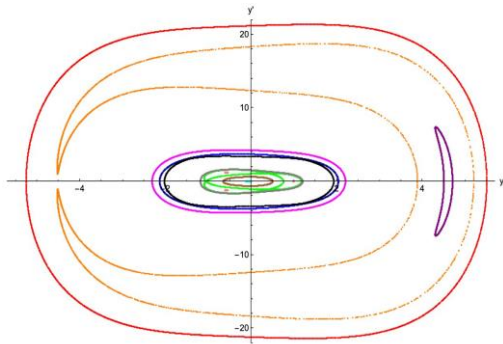


Fig. 1. Point mapping for  $\Omega = 4, F = 1$

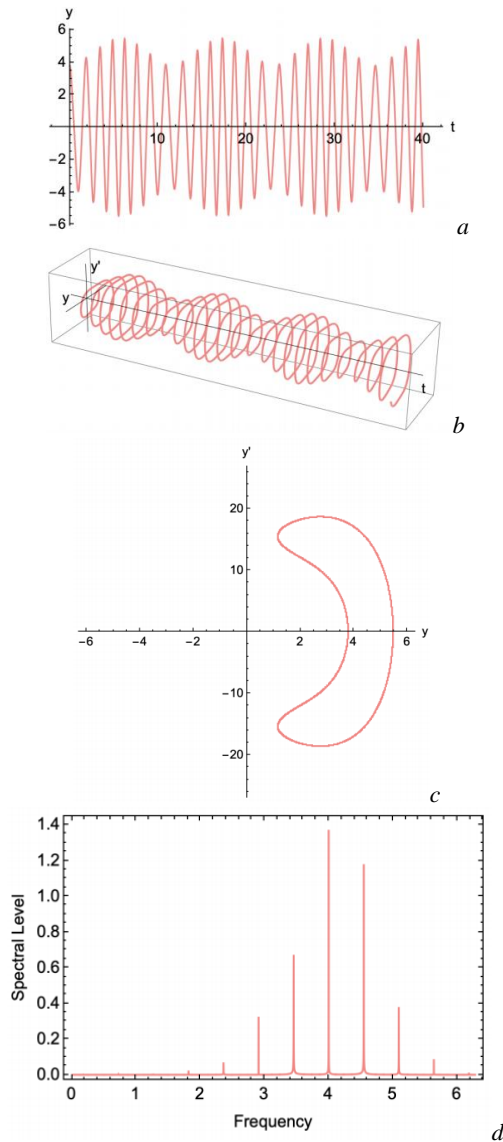


Fig. 2. Phase oscillations near the main resonance for  $\Omega = 4, F = 5$ : a – oscillations' plot, b – 3D phase portrait, c – point mapping, d – spectrum

Fig. 2 characterizes the phase oscillations around the main resonance – nonlinear analogue of beating, when perturbation of the oscillations' amplitude is accompanied by the variation of their frequency due to the non-isochronism of the nonlinear oscillator. An equidistant set of lateral frequencies around the fundamental one appears in the spectrum.

Fig. 3 shows the point mapping similar to fig. 1, but for the larger amplitude of the external force ( $F = 5$ ). It presents the formation of several areas of stochastic dynamics, that will be discussed below. Alternation of resonances in fig. 3 corresponds to the law of non-isochronism of free oscillations of a nonlinear oscillator. In this case, the frequency of free oscillations increases with the amplitude increase. So, the ratio of the resonance frequency to the frequency of the external force increases as the amplitude is increased. Indeed, this ratio for resonance 4 is  $1/3$ , for the next resonance 3 –  $1/2$ , for resonance 5 –  $5/9$ , for resonance 1 – 1, and finally for almost free oscillations  $10 - 5/4$ .

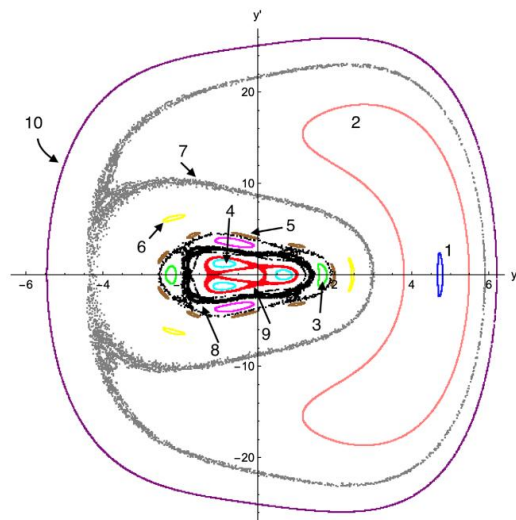


Fig. 3. Point mapping for  $\Omega = 4, F = 5$

### Stochastic oscillations

Fig. 4 illustrates the appearance of stochastic dynamics around the main resonance separatrix loop. The essence of this dynamics is unpredictable jumps between internal and external parts of the separatrix loop (line 7 on Fig. 3). Corresponding changes in the motion can be seen in the three-dimensional phase portrait (fig. 4 a). The separatrix on the mapping is blurred, and continual component appears in the spectrum (fig. 4 c). This behavior can be associated with the appearance of the heteroclinic structure in the vicinity of the saddle point [3].

Fig. 5 b illustrates the moment of the nonlinear resonances' overlapping in accordance with Chirikov's criterion, when the distance between the resonances decreases to the size of the order of their width. Simultaneous overlapping of several resonances of higher orders is presented in Fig. 5 b. Comparison with fig. 1 (obtained for the smaller amplitude of the external force) moves to the conclusion that one of them is a resonance on the half of the main harmonic, that corresponds to a set of four loops of the separatrix connected by saddle points. As in the previous case, the plot of oscillations (fig. 5 a) demonstrates random transitions between phase oscillations that correspond to different resonances. Further increase in the amplitude of the external force leads to the formation of the wide area of the stochastic motion (stochastic sea) with small islands of stability on the mapping.

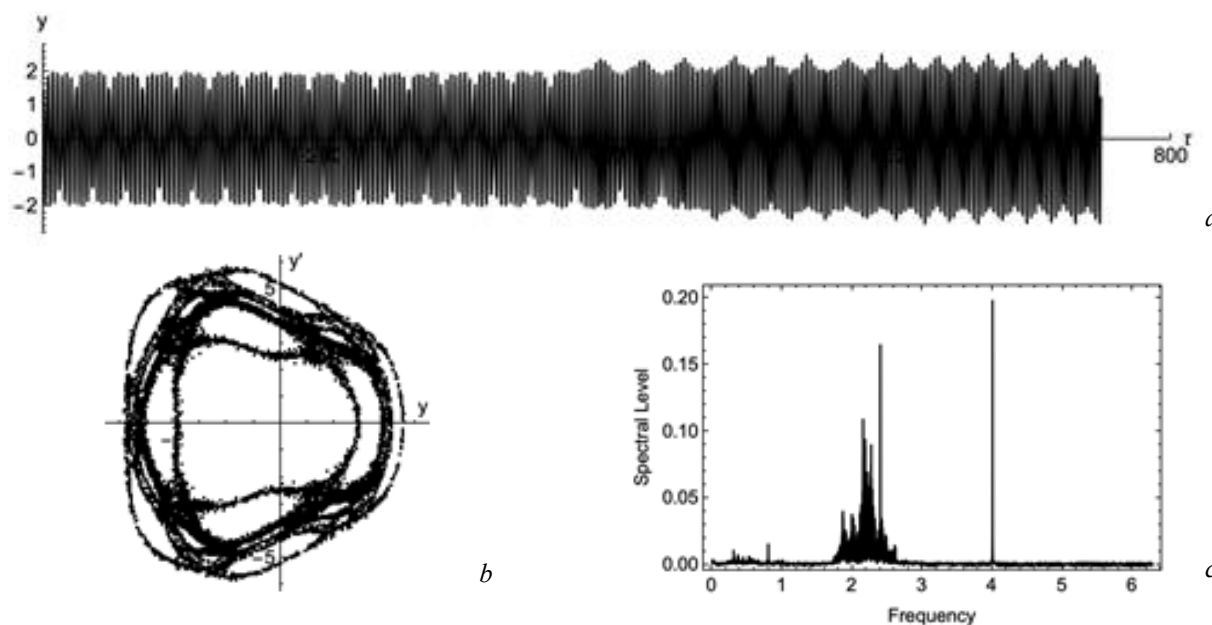


Fig. 5. Stochastic layer formed due to the overlap of nonlinear resonances ( $\Omega=4, F=5$ ): a – oscillations' plot; b - point mapping; c - spectrum

### Conclusions

1. Sequence of the alternation of higher-order resonances on the point mapping is determined by the free oscillations' law of non-isochronism (in this case, by the increase of the free oscillations' frequency with an increase of their amplitude).

2. One of the possible types of stochastic dynamics in the Duffing model is associated with random jumps between different parts of the separatrix, connected by saddle points. It is associated with heteroclinic structures in the vicinity of these points.

3. At external force amplitudes greater than a certain threshold value, the stochastic dynamics of the Duffing

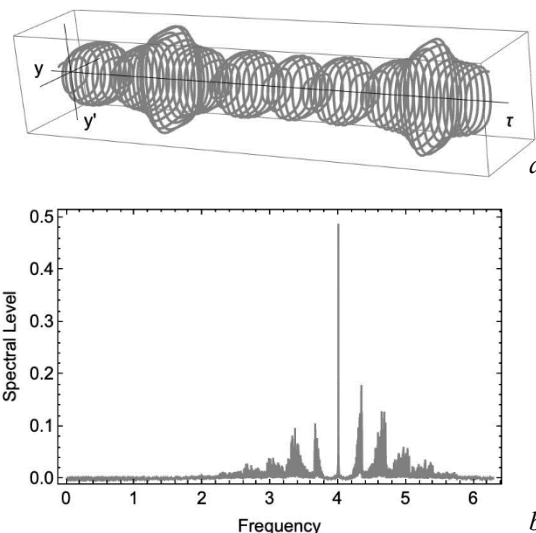


Fig. 4. Stochastic layer near the separatrix of the main resonance ( $\Omega=4, F=5$ ): a – 3D phase portrait, b - spectrum

oscillator is sometimes associated with the overlapping of nonlinear resonances according to the Chirikov's criterion. As in the previous case, jumping between resonances may be accompanied by a change in the amplitude of oscillations.

### References

1. Yu.I. Neimark, P.S. Landa. *Stochastic and chaotic oscillations*. (Nauka, Moscow, 1987), 424 p. [In Russian]
2. G.M. Zaslavskiy, R.Z. Sagdeev. *Introduction to nonlinear physics: from pendulum to turbulence and chaos*. (Nauka, Moscow, 1988), 368 p. [In Russian]
3. M. Tabor. *Chaos and integrability in nonlinear dynamics*. (J. Wiley & Sons, New York, 1989), 384 pp.

## ІНФОРМАЦІЯ ДЛЯ АВТОРІВ СТАТЕЙ

журналу «Вісник ХНУ імені В.Н. Каразіна». Серія «Фізика»

У журналі «Вісник ХНУ імені В.Н. Каразіна». Серія «Фізика» друкуються статті та стислі за змістом повідомлення, в яких наведені оригінальні результати теоретичних та експериментальних досліджень, а також аналітичні огляди літературних джерел з різноманітних актуальних проблем фізики за тематикою видання.

Мова статей – українська, англійська.

### ТЕМАТИКА ЖУРНАЛУ

1. Теоретична фізика.
2. Фізика твердого тіла.
3. Фізика низьких температур.
4. Фізика магнітних явищ.
5. Оптика та спектроскопія.
6. Загальні питання фізики і серед них: методологія та історія фізики, математичні методи фізичних досліджень, методика викладання фізики у вищій школі, техніка та методика фізичного експерименту тощо.

### ВИМОГИ ДО ОФОРМЛЕННЯ РУКОПИСІВ СТАТЕЙ

Загальний обсяг тексту рукопису статті повинен займати не більше, ніж 15 сторінок.

Рукопис статті складається з титульної сторінки, на якій вказано: назва статті; ініціали, прізвища та ORCID всіх авторів, поштова адреса установи, в якій була виконана робота; класифікаційний індекс за системами PACS та УДК; анотації із ключовими словами на окремому аркуші з прізвищем та ініціалами авторів і назвою статті, викладені українською, російською та англійською мовами; основний текст статті; список літератури; підписи під рисунками; таблиці; рисунки: графіки, фотознімки.

Анотація повинна бути за об'ємом не менш ніж 1800 символів. Стаття повинна бути структурована. Висновки потрібно пронумерувати та в них повинні бути висновки, а не переписана анотація.

Електронний варіант рукопису статті повинен відповідати таким вимогам: текст рукопису статті повинен бути набраний у форматі MicrosoftWord версії 2013, вирівнювання тексту повинне бути здійснене за лівим краєм, гарнітура TimesNewRoman, без прописних букв у назвах, букви звичайні рядкові, з полями ліворуч, праворуч, зверху і знизу по 2,5 см, формули повинні бути набрані в MathType (не нижче версії 6,5), у формулах кирилиця не допускається, символи з нижніми і верхніми індексами слід набирати в MicrosoftWord, ширина формули не більше 70 мм, графіки та фотографії необхідно подавати в графічному форматі, розрізнення не менше 300 dpi, поширення файлів повинно бути \*.jpg, шириною в одну чи дві колонки, для однієї колонки розміри: завширшки 8 см, для двох колонок – 16 см. Масштаб на мікрофотографіях необхідно представляти у вигляді масштабної лінійки.

### ВИМОГИ ДО ОФОРМЛЕННЯ ГРАФІКІВ

Товщина ліній не більше 0,5 мм, але не менше 0,18 мм. Величина літер на підписах до рисунків не більш 14 pt, але не менше 10 pt, гарнітура Arial.

### ПРИКЛАД ОФОРМЛЕННЯ СПИСКУ ЛІТЕРАТУРИ

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теорія пружності, Наука, М. (1978), 730 с.
2. И.И. Иванов. ФТТ, 25, 7, 762 (1998).
3. A.D. Ashby. Phys.Rev., A19, 213 (1985).
4. D.V. Vert. In Progress in Metals, ed. by R. Speer, USA, New York (1976), v.4, p.17.

### ДО РЕДАКЦІЇ НАДАЄТЬСЯ

1. Два роздруковані примірники рукопису статті, які підписані її авторами.
2. Електронна версія рукопису та дані щодо контактів для спілкування з її авторами. Для цього потрібно надіслати електронною поштою, тільки на адресу physics.journal@karazin.ua.
3. Направлення від установи, де була виконана робота, і акти експертизи у двох примірниках; адресу, прізвище, повне ім'я та батькові авторів; номери телефонів, E-mail, а також зазначити автора рукопису, відповідального за спілкування з редакцією журналу.

Матеріали рукопису статті потрібно направляти за адресою: Редакція журналу «Вісник Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна. Серія: фізика», Мозуль К.О., фізичний факультет, майдан Свободи, 4, Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна. тел. (057)-707-56-30.

## ИНФОРМАЦИЯ ДЛЯ АВТОРОВ СТАТЕЙ

журнала «Вестник ХНУ имени В.Н. Каразина». Серия «Физика»

В журнале «Вестник ХНУ имени В.Н. Каразина». Серия «Физика» печатаются статьи и короткие по содержанию сообщения, в которых приведены оригинальные результаты теоретических и экспериментальных исследований, а также аналитические обзоры литературных источников по различным актуальным проблемам физики по тематике издания.

Язык статей - украинский, английский.

### ТЕМАТИКА ЖУРНАЛА

1. Теоретическая физика.
2. Физика твердого тела.
3. Физика низких температур.
4. Физика магнитных явлений.
5. Оптика и спектроскопия.
6. Общие вопросы физики и среди них: методология и история физики, математические методы физических исследований, методика преподавания физики в высшей школе, техника и методика физического эксперимента.

### ТРЕБОВАНИЯ К ОФОРМЛЕНИЮ РУКОПИСИ СТАТЬИ

Общий объем текста рукописи статьи должен занимать не более 15 страниц.

Рукопись статьи состоит из титульного листа, на котором указано: название статьи; инициалы, фамилии и ORCID всех авторов, почтовый адрес учреждения, в котором была выполнена работа; классификационный индекс по системам PACS и УДК; аннотации с ключевыми словами на отдельном листе с фамилией и инициалами авторов и названием статьи, изложенные на украинском, русском и английском языках; основной текст статьи; список литературы; подписи под рисунками; таблицы; рисунки: графики, фотоснимки.

Аннотация должна быть по объему не менее чем 1800 символов. Статья должна быть структурирована. Выводы нужно пронумеровать и в них должны быть выводы, а не переписанная аннотация.

Электронный вариант рукописи статьи должен соответствовать следующим требованиям: текст рукописи статьи должен быть набран в формате MicrosoftWord версии 2013, выравнивание текста должно быть осуществлено по левому краю, гарнитура TimesNewRoman, без прописных букв в названиях, буквы обычные строчные, с полями слева, справа, сверху и снизу по 2,5 см, формулы должны быть набраны в MathType (не ниже версии 6,5), в формулах кириллица не допускается, символы с нижними и верхними индексами следует набирать в MicrosoftWord, ширина формулы не более 70 мм, графики и фотографии необходимо подавать в графическом формате, разрешение не менее 300 dpi, расширение файлов должно быть \*.jpg, шириной в одну или две колонки, для одной колонки размеры: ширина 8 см, для двух колонок - 16 см. Масштаб на микрофотографиях необходимо представлять в виде масштабной линейки.

### ТРЕБОВАНИЯ К ОФОРМЛЕНИЮ ГРАФИКОВ

Толщина линий не более 0,5 мм, но не менее 0,18 мм. Размер букв на подписях к рисункам не больше 14 pt, но не менее 10 pt, гарнитура Arial.

### ПРИМЕР ОФОРМЛЕНИЯ СПИСКА ЛИТЕРАТУРЫ

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости, Наука, М. (1978), 730 с.
2. И.И. Иванов. ФТТ, 25, 7, 762 (1998).
3. A.D. Ashby. Phys.Rev., A19, 213 (1985).
4. D.V. Vert. In Progress in Metals, ed. by R. Speer, USA, New York (1976), v.4, p.17.

### В РЕДАКЦИЮ ПРЕДОСТАВЛЯЕТСЯ

1. Два распечатанные экземпляра рукописи статьи, подписанные ее авторами.
2. Электронная версия рукописи и контактные данные для общения с ее авторами. Для этого необходимо отправить рукопись по электронной почте, на адрес [physics.journal@karazin.ua](mailto:physics.journal@karazin.ua).
3. Направление от учреждения, где была выполнена работа, и акты экспертизы в двух экземплярах; адрес, фамилия, полное имя и отчество авторов; номера телефонов, E-mail, а также указать автора рукописи, ответственного за общение с редакцией журнала.

Материалы рукописи статьи необходимо направлять по адресу: Редакция журнала «Вестник Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина. Серия «Физика», Мозуль К.А., физический факультет, площадь Свободы, 4, Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина. тел. (057)-707-56-30.

## INFORMATION FOR THE AUTHORS OF THE ARTICLES

The Journal of V.N. Karazin Kharkiv National University Series Physics

The Journal of V.N. Karazin Kharkiv National University Series Physics publishes articles and concise messages that contain original results of theoretical and experimental studies, as well as analytical reviews of literary sources on various topical issues of physics on the subject of the publication.

The language of the articles is Ukrainian, English and Russian.

### TOPIC OF THE JOURNAL

1. Theoretical physics.
2. Solid state physics.
3. Physics of low temperatures.
4. Physics of magnetic phenomena.
5. Optics and spectroscopy.
6. General issues of physics and among them: methodology and history of physics, mathematical methods of physical research, methods of teaching physics in high school, technique and methods of physical experiment, etc.

### REQUIREMENTS FOR ARTICLES

The total volume of the manuscript should be no more than 15 pages.

The manuscript of the article consists of a cover page, which states: the title of the article; the initials, surnames and ORCID of all authors, the mailing address of the institution where the work was performed; classification index for PACS and UDC systems; annotations with keywords on a separate sheet with the author's surname and initials and article title, set out in Ukrainian, Russian and English; the main text of the article; list of references; captions under figures; tables; figures: graphics, photographs.

The abstract should be at least 1800 characters in length. The article should be structured. The conclusions should be numbered and should contain the conclusions, not the rewritten abstract.

The electronic version of the manuscript should meet the following requirements: the text of the manuscript should be typed in MicrosoftWord 2013. The text should be left-aligned, the TimesNewRoman font, without uppercase letters, lowercase letters, left, right, right and 2.5 cm below, formulas must be typed in MathType (not lower than 6.5), Cyrillic not allowed, characters with lower and upper indexes should be typed in MicrosoftWord, formula width is not more than 70 mm, graphics and photos need n should be given in graphical format, with a resolution of at least 300 dpi, file distribution should be \*.jpg, width of one or two columns, for one column the sizes: 8 cm wide, for two columns - 16 cm wide. The scale on the micrographs should be represented as a scale bar.

### REQUIREMENTS FOR THE GRAPHS

The thickness of the lines is not more than 0.5 mm, but not less than 0.18 mm. The size of the letters on the captions to the drawings is not more than 14 pt, but not less than 10 pt, the Arial headset.

### EXAMPLE OF THE REFERENCES

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости, Наука, М. (1978), 730 с.
2. И.И. Иванов. ФТТ, 25, 7, 762 (1998).
3. A.D. Ashby. Phys.Rev., A19, 213 (1985).
4. D.V. Vert. In Progress in Metals, ed. by R. Speer, USA, New York (1976), v.4, p.17.

### PROVIDED TO THE EDITOR

1. Two printed copies of the manuscript signed by authors.
2. Electronic version of the manuscript and contact information for communication with authors. To do this, you need to send an email only to physics.journal@karazin.ua.
3. Directions from the institution where the work was performed and expert acts in two copies; the name, full name and patronymic of the author; telephone numbers, E-mail, and indicate the author of the manuscript responsible for communicating with the journal.

The materials of the manuscript should be sent to the following address: Editorial of The The Journal of V.N. Karazin Kharkiv National University Series Physics, K.A. Mozul, Faculty of Physics, Svobody Square, 4, V.N. Karazin Kharkiv National University. tel. (057) -707-56-30.

Наукове видання

Вісник Харківського національного університету  
імені В.Н. Каразіна

**Серія “Фізика”**  
**випуск 34**

Збірник наукових праць

Англійською, українською та російською мовами.

Комп’ютерне верстання К.О.Мозуль

Підписано до друку 1.06.2021. Формат 60x84 1/8. Папір офсетний.

Друк цифровий.

Ум. друк. арк. **9.77**. Обл.-вид. арк **9.93**

Наклад 100 пр. Зам. № **21/20**

61022, Харків, майдан Свободи, 4  
Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна  
Видавництво

Надруковано: ХНУ імені В.Н. Каразіна

61022, Харків, майдан Свободи, 4. Тел.+38-057-705-24-32  
Свідоцтво суб’єкта видавничої справи ДК №3367 від 13.01.09