

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Одеський національний університет імені
І. І. Мечникова

**СЕНСОРНА
ЕЛЕКТРОНІКА
І МІКРОСИСТЕМНІ
ТЕХНОЛОГІЇ
2018 — Т. 15, № 4**

Науково-технічний журнал

Заснований 13.11.2003 року.
Виходить 4 рази на рік

УДК 681.586

Засновник Одеський національний
університет імені І. І. Мечникова

За підтримки Українського фізичного
товариства

Свідоцтво про державну реєстрацію КВ
№ 8131

Журнал входить до переліку фахових видань
ВАК України з фізико-математичних,
технічних та біологічних наук

Журнал реферується РЖ «Джерело»
і ВІНІТІ (Росія), включено в міжнародні бази
Index Copernicus, РІНЦ, наукова електрон-
на бібліотека Cross Ref. Elibrary, Directory of
Research Journal Indexing, General Impact Factor

Видається за рішенням Вченої ради
Одеського національного університету
імені І. І. Мечникова
Протокол № 3 від 27.11.2018 р.

Адреса редакції:
вул. Дворянська, 2, МННФТЦ (НДЛІ-3),
Одеський національний університет
імені І. І. Мечникова, Одеса, 65082, Україна.
Тел./Факс: +38(048)723-34-61

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF
UKRAINE
Odessa I. I. Mechnikov National University

**SENSOR
ELECTRONICS
AND MICROSYSTEM
TECHNOLOGIES
2018 — VOL. 15, № 4**

Scientific and Technical Journal

It is based 13.11.2003 року.
The Journal issue four times a year

UDC 681.586

Founded by Odessa I. I. Mechnikov
National University

At support of the Ukrainian Physical Society

Certificate of State Registration КВ № 8131

The Journal is a part of list of the issues
recommended by SAK of Ukraine on physical
and mathematical, engineering and biological
sciences

The Journal is reviewed by RJ «Djerele»
and RJ ICSTI (Russia), is included in the
International Base Index Copernicus, RSCI,
Cross Ref. Elibrary, Directory of Research
Journal Indexing, General Impact Factor

Publishes on the resolution of Odessa
I. I. Mechnikov National University
Scientific Council. *Transaction № 3,
27, 11, 2018*

Editorial address:
2, Dvoryanskaya Str., ISEPTC (RL-3),
Odessa I. I. Mechnikov National University,
Odessa, 65082, Ukraine.
Ph./Fax: +38(048)723-34-61

Редакційна колегія

Головний редактор – **В. А. Сминтина**
Заступник головного редактора – **Я. І. Леніх**
А. П. Балабан (Одеса, Україна)
відповідальний секретар

О. Є. Беляєв (Київ, Україна)
І. В. Блонський (Київ, Україна)
В. Г. Вербицький (Київ, Україна)
Б. М. Галкін (Одеса, Україна)
Ю. В. Гуляєв (Москва, Росія)
Ю. О. Гунченко (Одеса, Україна)
А. Д'Аміко (Рим, Італія)
Н. Джаффрезік Рене (Ліон, Франція)
С. В. Дзяевич (Київ, Україна)
Г. В. Єльська (Київ, Україна)
В. О. Іваниця (Одеса, Україна)
О. М. Калашніков (Ноттінгем, Велика Британія)
І. А. Кравченко (Одеса, Україна)
Є. Д. Крушкін (Іллічівськ, Україна)
Вілко Лантто (Оулу, Фінляндія)
В. Г. Литовченко (Київ, Україна)
С. В. Ленков (Київ, Україна)
Є. В. Малахов (Одеса, Україна)
І. Г. Неівестний (Новосибірськ, Росія)
О. О. Птащенко (Одеса, Україна)
Д. Д. Ряботягов (Одеса, Україна)
С. М. Рябченко (Київ, Україна)
О. П. Солдаткін (Київ, Україна)
М. Ф. Стародуб (Київ, Україна)
Й. М. Стахіра (Львів, Україна)
М. В. Стріха (Київ, Україна)
О. В. Третяк (Київ, Україна)
А. Чаудхрі (Чандігар, Індія)

Editorial Board

Editor-in-Chief – **V. A. Smyntyna**
Vice Editor-in-Chief – **Ya. I. Lepikh**
A. P. Balaban (Odessa, Ukraine)
responsible editor

A. E. Belyaev (Kiev, Ukraine)
I. V. Blonskii (Kiev, Ukraine)
V. G. Verbitsky (Kiev, Ukraine)
B. M. Galkin (Odessa, Ukraine)
Yu. A. Gulyaev (Moscow, Russia)
Yu. O. Gunchenko (Odessa, Ukraine)
A. D'Amiko (Rome, Italy)
N. Jaffrezik Renault (Lyon, France)
S. V. Dzyadevych (Kiev, Ukraine)
G. V. Elskaya (Kiev, Ukraine)
V. O. Ivanytsia (Odessa, Ukraine)
O. M. Kalashnikov (Nottingham, United Kingdom)
I. A. Kravchenko (Odessa, Ukraine)
E. D. Krushkin (Illyichevsk, Ukraine)
Vilho Lantto (Oulu, Finland)
V. G. Litovchenko (Kiev, Ukraine)
S. V. Lenkov (Kiev, Ukraine)
E. V. Malakhov (Odessa, Ukraine)
I. G. Neizvestny (Novosibirsk, Russia)
A. A. Ptashchenko (Odessa, Ukraine)
D. D. Ryabotyagov (Odessa, Ukraine)
S. M. Ryabchenko (Kiev, Ukraine)
A. P. Soldatkin (Kiev, Ukraine)
N. F. Starodub (Kiev, Ukraine)
J. M. Stakhira (Lviv, Ukraine)
M. V. Strikha (Kiev, Ukraine)
A. V. Tretyak (Kiev, Ukraine)
A. Chaundhri (Chandigarh, India)

Науковий редактор випуску
та відповідальний за випуск – **Я. І. Леніх**

ЗМІСТ

CONTENTS

Фізичні, хімічні та інші явища, на основі яких можуть бути створені сенсори
Physical, chemical and other phenomena, as the bases of sensors

V. A. Shenderovskyi

FROM THE HISTORY OF UKRAINIAN ACADEMY OF SCIENCES (TO THE 100TH ANNIVERSARY OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE) 5

V. A. Шендеровський

З ІСТОРІЇ УКРАЇНСЬКОЇ АКАДЕМІЇ НАУК. (ДО 100-РІЧЧЯ НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ)

Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha

PHYSICS OF NANOTRANSISTORS: STRUCTURE, METRICS, AND CONTROL 18

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

ФІЗИКА НАНОТРАНЗИСТОРІВ: УСТРІЙ, МЕТРИКА ТА КЕРУВАННЯ

Оптичні, оптоелектронні і радіаційні сенсори
Optical and optoelectronic and radiation sensors

A. V. Glushkov, V. V. Buyadzhi, V. B. Ternovsky, A. V. Ignatenko, A. A. Kuznetsova, A. Mashkantsev

A CHAOS-DYNAMICAL APPROACH TO ANALYSIS, PROCESSING AND FORECASTING MEASUREMENTS DATA OF THE CHAOTIC QUANTUM AND LASER SYSTEMS AND SENSORS..... 41

О. В. Глушков, В. В. Буяджи, В. Б. Терновський, Г. В. Ігнатенко, Г. О. Кузнєцова, О. Машканцев

ХАОС-ДИНАМІЧНИЙ ПІДХІД ДО АНАЛІЗУ, ОБРОБКИ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ ДАНИХ ВИМІРЮВАННЯ ДЛЯ ХАОТИЧНИХ КВАНТОВИХ СИСТЕМ І СЕНСОРІВ

A. A. Kuznetsova, A. V. Glushkov, M. Yu. Gurskaya, A. A. Buyadzhi, V. B. Ternovsky

OPTIMIZED RELATIVISTIC OPERATOR PERTURBATION THEORY IN SPECTROSCOPY OF MULTIELECTRON ATOM IN A DC ELECTRIC FIELD: SENSING SPECTRAL PARAMETERS..... 50

Г. О. Кузнєцова, А. В. Глушков, М. Ю. Гурська, А. А. Буяджи, В. Б. Терновський

ОПТИМІЗОВАНА РЕЛЯТИВІСТСЬКА ОПЕРАТОРНА ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ В СПЕКТРОСКОПІЇ БАГАТОЕЛЕКТРОННОГО АТОМУ В ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ: ДЕТЕКТУВАННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ ПАРАМЕТРІВ

A. V. Ignatenko, A. V. Glushkov, O. Yu. Khetselius, Yu. Ya. Buniakova, A. A. Svinarenko

PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY OF DIATOMIC MOLECULES: HYBRID DENSITY FUNCTIONAL AND GREEN'S FUNCTIONS APPROACH TO SENSING MOLECULAR CONSTANTS 58

Г. В. Ігнатенко, О. В. Глушков, О. Ю. Хецеліус, Ю. Я. Бунякова, А. А. Свиначенко

ФОТОЕЛЕКТРОННА СПЕКТРОСКОПІЯ ДВОАТОМНИХ МОЛЕКУЛ: ГІБРИДНИЙ МЕТОД ФУНКЦІОНАЛУ ГУСТИНИ ТА ФУНКЦІЙ ГРІНА У ВИЗНАЧЕННІ МОЛЕКУЛЯРНИХ КОНСТАНТ

Біосенсори
Biosensors

G. B. Khaled, K. Muzyka

QUANTUM-CHEMICAL INVESTIGATIONS OF RUBRENE COMPLEXES WITH STEARIC ACID AND POLYMETHYLMETACRYLATE IN PREDICTION OF LANGMUIROGENICITY..... 67

Г. Б. Халед, К.М. Музыка

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ КОМПЛЕКСІВ РУБРЕНУ ЗІ СТЕАРИНОВОЮ КИСЛОТОЮ І ПОЛІМЕТИЛМЕТАКРИЛАТОМ У ПРОГНОЗУВАННІ ЛЕНГМЮРОГЕННОСТІ

Матеріали для сенсорів
Sensor materials

Ya. I. Lepikh, T. I. Lavrenova, N. M. Sadova, V. A. Borschak, A. P. Balaban, N. P. Zatovskaya

STRUCTURAL-PHASE TRANSFORMATIONS AND ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF THE COMPOSITE MATERIALS BASED ON “SiO₂-B₂O₃-Bi₂O₃-ZnO-BaO” SYSTEM..... 77

Я. І. Леніх, Т. І. Лавренова, Н. М. Садова, В. А. Борщак, А. П. Балабан, Н. П. Затовська

СТРУКТУРНО-ФАЗОВІ ПЕРЕТВОРЕННЯ І ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ НА БАЗІ СИСТЕМИ “SiO₂-B₂O₃-Bi₂O₃-ZnO-BaO”

V. R. Kolbunov, O. V. Vasheruk

ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF POLYMER COMPOSITE PP-VO₂ 85
В. Р. Колбунов, О. В. Вашерук

ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ ПОЛІМЕРНОГО КОМПОЗИТУ PP-VO₂

L. Filevska, A. Chebanenko, M. Klochkov, V. Grinevych, V. Smyntyna

SENSITIVITY OF THIN TIN DIOXIDE FILMS OBTAINED WITH THE USE OF POLYMERS TO HUMIDITY AND ETHANOL..... 93

Л. М. Філевська, А. П. Чебаненко, М. А. Клочков, В. С. Гриневич, В. А. Сминтина

ВОЛОГО І ЕТАНОЛО ЧУТЛИВІСТЬ ТОНКИХ ПЛІВОК ДІОКСИДУ ОЛОВА, ОТРИМАНИХ З ВИКОРИСТАННЯМ ПОЛІМЕРІВ

Сенсори та інформаційні системи
Sensors and information systems

V. G. Melnik, P. I. Borshchev, A. D. Vasylenko, A. V. Slitskiy

OPTIMIZATION OF THE STRUCTURE AND ALGORITHM OF THE WORK OF THE HIGHLY-SENSITIVE MULTI-SENSORS SYSTEM WITH IMPEDANCE TRANSDUCERS..... 100

В. Г. Мельник, П. І. Борщев, А. Д. Василенко, А. В. Слицкий

ОПТИМИЗАЦИЯ СТРУКТУРЫ И АЛГОРИТМА РАБОТЫ ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНОЙ МУЛЬТИСЕНСОРНОЙ СИСТЕМЫ С ИМПЕДАНСНЫМИ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯМИ

Рекомендації Міжнародної конференції з інформаційно-телекомунікаційних технологій та радіоелектроніки (УкрМіКо’2018/UkrMiCo’2018)..... 110

Інформація для авторів. Вимоги до оформлення статей у журнал..... 123

Information for contributors. The requirements on papers preparation..... 126

ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

УДК 061.12.044.2

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150482>

З ІСТОРИЇ УКРАЇНСЬКОЇ АКАДЕМІЇ НАУК (ДО 100-РІЧЧЯ НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ)

В. А. Шендеровський

Інститут фізики НАН України, просп. Науки, 46, Київ, 03028,
schender@iop.kiev.ua, (044)525-07-77

З ІСТОРИЇ УКРАЇНСЬКОЇ АКАДЕМІЇ НАУК (ДО 100-РІЧЧЯ НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ)

В. А. Шендеровський

Анотація. У роботі подано коротку інформацію про долю вчених, науковими доробками яких закладався фундамент Української академії наук. Імена перших дійсних членів УАН (більшість з них) були практично забуті і вилучені з енциклопедичних довідників радянської доби, а наукова спадщина потрапила у забуття.

Ключові слова: академія, відділ, освіта, наукова праця

FROM THE HISTORY OF UKRAINIAN ACADEMY OF SCIENCES (TO THE 100TH ANNIVERSARY OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE)

V. A. Shenderovskiy

Abstract. The paper gives brief information on the fate of scientists, the scientific achievements of which laid the foundation of the Ukrainian Academy of Sciences. The names of the first real

members of the UAN (most of them) were practically forgotten and removed from encyclopaedic books of the Soviet era, and the scientific heritage fell into oblivion.

Keywords: academy, department, education, scientific work

ИЗ ИСТОРИИ УКРАИНСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (К 100-ЛЕТИЮ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК УКРАИНЫ)

В. А. Шендеровский

Аннотация. В работе дана краткая информация о судьбе ученых, научными разработками которых закладывался фундамент Украинской академии наук. Имена первых действительных членов УАН (большинство из них) были практически забыты и изъяты из энциклопедических справочников советской эпохи, а научное наследие было забыто.

Ключевые слова: академия, отдел, образование, научная работа

Вступ

Ідея створення Української академії найперше виникла серед членів Наукового товариства імені Тараса Шевченка, заснованого у Львові 1873 року: «Товариство ім. Шевченка намагалося своєю діяльністю наблизитись до таких завдань, які виконує академія наук, і на деяких ділянках наукової праці воно з честю могло рівнятись до академій інших націй...» Але ідея потребувала чину.

8 липня 1917 року на засіданні Українського наукового товариства (УНТ) сформували Комісію для організації Академії наук. Однак лише в травні наступного року, коли міністром освіти в уряді Скоропадського став відомий історик Микола Василенко, почалася робота. Василенко послідовно і наполегливо відстоював кандидатуру Вернадського на посаду керівника майбутньої академії. Незабаром з Полтави до Києва приїхав і сам Вернадський. Саме в цей період найяскравіше проявилася подвижницька діяльність Вернадського задля створення Української академії наук. У листі до професора східних мов у

Москві Агатангела Кримського він, запрошуючи вченого до організації Академії наук у Києві, зокрема пише: «... вважаю важливою цю установу і з точки зору українського відродження, і з точки зору загальнолюдської...»

Ці думки Вернадський виклав також у програмній промові «До заснування Української Академії в Києві» на першому засіданні новоствореної Комісії з вироблення законопроекту УАН 9 липня 1918 року.

Вернадський розумів: «Важливо створити сильний центр наукових досліджень українського народу, його історії, його мови, природи України. Звичайно, треба вести ці дослідження не за національною ознакою, а в найширшому загальнолюдському масштабі. Треба якнайшвидше створювати катедри і лабораторії, інститути, які спочатку, можливо, й будуть зайняті росіянами... Але становище скоро зміниться, бо посади в Академії виборні. Дуже скоро заявлять про себе місцеві сили».

Ці дуже цікаві спогади Вернадського про заснування Академії наук вперше надруковано у повному обсязі у 22 випуску щорічника

«Наука і культура» за 1988 рік. Володимир Вернадський написав їх 1943 року на прохання тодішнього президента Академії наук УРСР Олександра Богомольця. Ось ще одна цитата: «У Києві мого часу і в Українських територіальних університетах – Київському, Харківському, Одеському – ідейно українські вчені на роботу не могли влаштуватися. Навпаки, на історико-філологічних факультетах, де національні традиції могли проявлятися яскраво і сильно, підбір професорів для України був надзвичайно несприятливий. Систематично за понад сорок років Міністерство заміщало катедри історії особами, котрі ставилися до українського руху різко негативно або вороже. В цих університетах завжди існувала більшість, яка систематично проводила тенденцію русифікації». Ця думка вченого, на жаль, актуальна і сьогодні.

Не применшуючи ролі УНТ, історична справедливість вимагає визнати, що вирішальну роль у створенні Академії відіграли наукові сили, об'єднані Вернадським і Василенком.

З метою організації Української академії наук було створено комісію для підготовки законопроекту про заснування УАН. Вчені виробили концепцію установи, в якій збігалися б інтереси творчої особистості і наукового колективу, фундаментальної та прикладної науки.

Але йшла Перша світова війна. Коли у вересні вона почала добігати кінця, то зрозумілою для всіх стала поразка центральних держав. Це відбулося і на настроях багатьох членів Ради Міністрів, тож гетьману довелося реорганізувати її склад. До нового кабінету Федора Лизогуба було прийнято кілька членів з Української партії соціалістів-федералістів, серед яких був і Петро Стебницький, призначений міністром народної освіти та мистецтв. Своєю незламною енергією за короткий час він «переводить через всі стадії підготовки й затвердження закон про Українську академію наук». І вже 14 листопада 1918 року законом українського уряду було засновано Українську академію наук, також було схвалено закон про земельну реформу. На цьому указі стоїть і підпис міністра народної освіти та мистецтв при уряді Скоропадського Петра Стебницького.

Зауважимо, що саме 14 листопада замість Кабінету Міністрів Лизогуба утворено інший кабінет із російських монархістів (останнім міністром освіти в уряді Скоропадського був Володимир Науменко). Отож заслуга Петра Стебницького, хай там якими були інші його здобутки, є визначальною в історії української науки.

Згідно із запропонованим статутом, дійсними членами УАН могли бути не лише громадяни Української Держави, але й українські вчені із Західної України, а також іноземці за згодою двох третин дійсних членів УАН. Перших академіків було призначено постановою уряду 14 листопада. Всього 12 дійсних членів: геологи Володимир Вернадський та Павло Тутковський, біолог Микола Кащенко, механік Степан Тимошенко, правознавець Федір Тарановський, сходознавець Агатангел Кримський та мовознавець Микола Петров, лінгвіст Степан Смаль-Стоцький, історики Дмитро Багалій та Орест Левицький, економісти Михайло Туган-Барановський та Володимир Косинський.

27 листопада 1918 року відбулося перше засідання вищого органу новоствореної академії. Президентом УАН було одностайно обрано Володимира Вернадського, віце-президентом – Дмитра Багалія, а неодмінним секретарем Агатангела Кримського. Було затверджено і перші три відділи академії: Історико-філологічний, Фізико-математичний і Відділ соціальних наук, які охоплювали 3 інститути, 15 комісій і національну бібліотеку.

Після захоплення Києва більшовиками, у грудні 1919 року Вернадський подав у відставку і президентом УАН став Орест Левицький, а сама організація 14 червня 1921 року була перейменована на Всеукраїнську академію наук (ВУАН) і підпорядкована наркомату освіти. Того ж року до ВУАН приєднано Київську археологічну комісію, Українське наукове товариство у Києві, Історичне товариство Нестора Літописця, Всенародну бібліотеку (тепер – Національна бібліотека України імені В. Вернадського). Для діяльності академії надано у користування садибу пансіону графині Левашової у Києві (тепер – приміщення Президії НАН України).

Мета нашої розвідки – подати бодай стислу інформацію про долю вчених, науковими доробками яких закладався фундамент Української академії наук.

**Володимир Вернадський
(12.03.1863 – 6.01.1945)
перший президент УАН,
член Фізико-математичного відділу (II Відділ)**

Народився Володимир Іванович Вернадський в Петербурзі, де служив на той час його батько.

1873 року розпочав навчання в Харківській гімназії, а продовжив 1876 – у Петербурзі. 1881 року був зарахований на природниче відділення фізико-математичного факультету Петербурзького університету, який закінчив 1885 року з відзнакою.

Два роки працював хранителем мінералогічного музею університету, потім поглиблював знання в Італії, Франції, Німеччині. З 1890 року – доцент, а з 1898-го – професор Московського університету. З 1914 року очолював геологічний і мінералогічний музей Петербурзької академії, членом якої – академіком – став 1909 року.

У 1917 році Володимира Вернадського запросили до Тимчасового уряду на посаду заступника міністра освіти. А вже після Жовтневого перевороту він змушений був залишити Петроград і переїхати в Україну, на Полтавщину.

Його ставлення до більшовизму було однозначне: *«... я дивлюся на більшовицький рух як на велике нещастя. В їхньому середовищі нині відкривається рідкісний в історії обурливий вплив на життя людей великих злочинців і великих грішників. Убивці, злодії, грабіжники. Люди з цього оточення впливають на життя Росії і всього світу...»*

З жовтня 1917 по березень 1921 року жив і працював в Україні, усі зусилля спрямувавши на створення Української академії наук. 1918 року був одноставно обраний її першим президентом (був ним до грудня 1919 року).

У 1920-21 роках – професор Таврійського університету у Сімферополі.

1922 року змушений повернутися до Петрограда. За його участі було створено Радієвий інститут у складі АН СРСР, директором якого вчений був з 1922 до 1939 року.

1935 року переїхав до Москви, де організував низку наукових комісій, працював над проблемою «життя в космосі».

Володимир Вернадський став основоположником вчення про біосферу та ноосферу. Був обраний професором Лондонської школи слов'янських студій, членом Академії наук у Парижі, Чеської академії наук і мистецтв, дійсним членом НТШ з 1903 року. На його честь названо мінерал вернадит.

Помер Володимир Іванович 6 січня 1945 року. Поховано вченого у Москві на Новодівочому цвинтарі.

Син Георгій емігрував до США, де згодом став професором російської історії Єльського університету.

Досягнення вченого у радянські часи привласнила російська наука, Вернадського називали «видатним радянським вченим», не згадуючи про його українське коріння.

**Микола Кащенко
(7.05.1855–29.03.1935)
голова Фізико-математичного відділу (II Відділ)**

Народився Микола Феофанович Кащенко на хуторі Веселий Олександрівського повіту Катеринославської губернії (тепер смт Веселе Запорізької області) 7 травня 1855 року у багатодітній сім'ї дрібномаєтних дворян козацького походження.

1875 року закінчив зі срібною медаллю гімназію. Вищу медичну освіту спершу здобував на медичному факультеті Московського університету, а 1876 року перевівся до Харківського університету на медичний факультет. 1880 року Микола Кащенко закінчив навчання в університеті зі званням повітового лікаря.

1884 року успішно захистив докторську дисертацію, одержав ступінь доктора медичних наук і звання приват-доцента порівняльної анатомії.

З 1886 року перебував у Німеччині та Італії. Через два роки вчений повернувся до Хар-

кова і почав читати лекції на медичному і фізико-математичному факультетах.

1888 року переїхав до Томська, де Кашенка призначили екстраординарним професором Імператорського університету по кафедрі зоології, порівняльної анатомії та фізіології. Очолював палеонтологічні розкопки в околицях Томська.

Рада Московського університету 1901 року надала йому науковий ступінь доктора зоології за великий обсяг наукових зоологічних досліджень.

1906 року вчений тимчасово виконував обов'язки ректора Томського університету.

1912 року за станом здоров'я переїхав до Києва.

Працював у Київському політехнічному інституті, очолював кафедру зоології сільськогосподарського відділення.

14 листопада 1918 року Миколу Кашенка призначили академіком УАН. Впродовж 1918-1921 років очолював 2-ий Фізико-математичний відділ УАН, кафедру акліматизації та зоологічний кабінет.

З 1918 року по 1933 рік працював директором Акліматизаційного саду УАН.

1919 року разом з Володимиром Каравасвим створив у Києві Зоологічний музей, був його директором до 1927 року.

Микола Кашенко був дійсним членом товариств природодослідників при Харківському та Київському університетах, Харківського товариства дослідних наук, Київського товариства дослідників природи, Київського товариства сільського господарства.

1932-33 роки... У страшні часи Голодомору вчений допомагав хворим, даруючи лікарські рослини німеччинам і виснаженим голодом людям.

Науковий доробок академіка складає понад 200 наукових праць з ембріології, гістології, археології, палеонтології, зоології, акліматизації культурних рослин в умовах Сибіру і України.

1933 року Микола Кашенко тяжко захворів. Не стало видатного вченого-біолога 29 березня 1935 року. Поховано його на Лук'янівському цвинтарі у Києві.

Павло Тутковський

(1.03.1858-3.06.1930)

член Фізико-математичного відділу (II Відділ)

Павло Тутковський народився 1 березня 1858 року в селищі Липовці теперішньої Вінницької області в родині службовця.

1877 року вступив на природниче відділення фізико-математичного факультету Київського університету. Виключений з нього 1879 року за участь у студентському заколоті. Закінчив курс у 1882 році.

Через рік його призначили консерватором мінералогічного і геологічного кабінету. На цій посаді він пропрацював одинадцять років.

1883 року його обрали почесним членом Київського товариства природознавців, 1886 – дійсним членом Петербурзького мінералогічного товариства, 1888 – членом Бельгійського товариства геології і палеонтології в Брюсселі, 1889 року – почесним членом Товариства любителів природознавства, антропології та етнографії при Московському університеті.

1895 року подав свій проект водопостачання Києва артезіанською водою. Згодом відкрив артезіанські води і карстові явища на Волині і в Білорусії.

Наступні 18 років учений викладав природознавство, географію, фізику в школах Києва, Луцька, Житомира, працював на посаді позаштатного співробітника Петербурзького геологічного комітету.

1911 року Павло Тутковський захистив докторську дисертацію, і того ж року Казанський університет присудив йому вчений ступінь доктора мінералогії і геології «гоноріс кауза».

1919 року – голова Сільськогосподарського наукового комітету України.

З 1924 року – голова науково-дослідної кафедри геології. Того ж року створив Геологічний музей у Києві. Активну участь брав також у організації бібліотеки Академії наук, Інституту наукової мови.

У 1923 році видав «Словник геологічної термінології». Автор понад тисячі наукових праць.

1928 року його обрано членом ВУЦВК і депутатом Київської міськради.

Наприкінці 1920-х років вченому прикріпили ярлик «націоналіста».

3 червня 1930 року Павло Аполлонович Тутковський помер.

Сина Сергія Тутковського – професора історії Київського університету – заарештували і знищили.

**Степан Тимошенко
(23.12.1878 – 29.05.1972)**

член Фізико-математичного відділу (II Відділ)

Народився Степан Тимошенко 23 грудня 1878 року в селі Шпотівка Конотопського повіту Чернігівської губернії у родині землеміра.

Початкову освіту отримав вдома, з 1889 до 1896 року навчався у Роменському реальному училищі. 1896 вступив до двох вузів: Інституту цивільних інженерів та Інституту шляхів у Петрограді. 1900 року успішно закінчив Інститут шляхів, відбув один рік цивільної повинності і почав працювати лаборантом механічної лабораторії у Шляховому інституті.

1903 року перейшов працювати до механічної лабораторії Петербурзького політехнічного інституту.

Наступного року здійснив поїздки до Берліна та Мюнхена, а 1905 року зовсім переїхав до Німеччини, де працював у Геттінгенському університеті у Людвіга Прандтля.

1907 року Степан Тимошенко очолив кафедру опору матеріалів у Київському політехнічному інституті.

1911 року вийшов друком знаменитий підручник вченого з опору матеріалів. Цього ж року міністр освіти звільнив його з роботи за підтримку студентського руху.

Переїхав до Петербурга, 1917 року повернувся до Києва, де отримав посаду професора у Київському політехнічному інституті.

1918 року став одним із перших 12 дійсних членів Академії наук, очолив Інститут механіки.

Настали буремні часи. Вчений спершу виїхав до Югославії, де викладав у Загребському політехнічному інституті, а згодом – до США.

З 1922 року – співробітник однієї із фірм, а потім працівник фірми «Вестінгауз».

1927 року – професор Мічиганського, а з вересня 1936 року – професор Каліфорнійського університету у Стенфорді.

1944 року подав у відставку.

Величезні заслуги Тимошенка у інженерній справі: він член численних академій і наукових товариств – УАН (1918), НТШ (1923), УВАН (1947), почесний член Товариства українських інженерів Америки (1953), член Американської національної, Англійської королівської, Італійської, Польської, СРСР академій інженерних наук; почесний член Американського товариства інженерів-механіків, Спільки швейцарських інженерів, член Інтернаціональної асоціації шляхів і т. ін.

Останні роки вчений прожив у Федеративній Республіці Німеччині у м. Вуперталі, у своєї дочки Ганни.

22 травня 1972 року Степан Тимошенко помер. Похований у американському місті Пало-Альто.

**Дмитро Багалій
(7.11.1857 – 9.02.1932)**

голова Історико-філологічного відділу (I Відділ)

Народився Дмитро Багалій 7 листопада 1857 року у сім'ї ремісника-лимаря у Києві. Рано залишився сиротою і виховувався у багатодітній сім'ї своєї тітки по матері.

Спочатку навчався у парафіяльному училищі та прогімназії, далі – у 2-й Київській гімназії, яку закінчив із золотою медаллю. Вищу освіту здобув на історико-філологічному факультеті Київського та Харківського університетів (1876–1880).

1880 року вступив до Київської громади.

З 1881 року – член Історичного товариства Нестора Літописця.

1883 року Багалій став доцентом кафедри російської історії Харківського університету, а з 1887 року – екстраординарний професор цієї кафедри.

У 1906–1910 роках – ректор Харківського університету.

У 1906 та 1910–1914 роках – член Державної Ради в Петербурзі від університетів.

У 1914–1917 роках – голова Харківської міської думи, міський голова Харкова, один із співзасновників Харківської громадської бібліотеки (нині – Державна наукова бібліотека ім. В. Короленка).

У вересні 1917 року очолив харківську «Просвіту».

З листопада 1918 року – дійсний член Української академії наук, з 1919 – голова її Історико-філологічного відділу.

Впродовж 1920-х-1930-х років викладав історію України у Харківському і Полтавському інститутах народної освіти.

1926 року – перший директор Науково-дослідного інституту ім. Тараса Шевченка.

Серед численних праць особливе значення мають праці, присвячені дослідженню Слобожанщини і Південної України: «Історія північної землі до половини XIV в.» (1882), «Нариси з історії колонізації степової окраїни Московської держави» (1887), «Нарис історії Харківського університету» (1893–1904), «Історія міста Харкова за 250 років його існування» (1905–1912), «Нарис з української історіографії» (Т. 1–11, 1923–1925), «Український мандрований філософ Григорій Сковорода» (1926).

Помер Дмитро Багалій 9 лютого 1932 року, похований у Харкові на міському кладовищі.

Агатангел Кримський
(15.01.1871-25.01.1942)

**неодмінний секретар УАН,
член Історико-філологічного відділу (I Відділ)**

Агатангел Кримський народився 15 січня 1871 року у Володимирі-Волинському.

Навчався в училищі, а згодом у Острозькій прогімназії. 1881 року його перевели до четвертого класу Другої київської гімназії Кромера. А вже через рік – у відому Колегію Павла Галагана. Згодом вступив до Лазаревського інституту східних мов у Москві, а через три роки до Московського університету на історико-філологічний факультет, який успішно закінчив 1896 року.

У 1896-98 роках, завдяки стипендії від Лазаревського, перебував на стажуванні у Сирії і Лівані.

1898 року став доцентом, а з 1900 аж до 1918 року — професор арабської філології й історії Сходу в Лазаревському інституті східних мов у Москві. За цей час написав капітальні праці з історії та літератури: «Історія арабської літератури», «Історія перської літератури», «Мусульманство і його будучність».

Загалом вчений знав 50 мов, опублікував понад 500 статей з історії мов, літератури, етнографії народів Близького і Середнього Сходу.

У 1918 році повернувся до Києва і став одним із організаторів УАН і її першим неодмінним секретарем.

З 1921 року – директор Інституту української наукової мови.

3 травня 1928 року члени Академії одноголосно переобрали Агатангела Кримського на неодмінного секретаря, але уряд не затвердив його на посаду.

1929 року ліквідували усі сходознавчі установи, всіх діячів кримської літератури та науки. Самого Кримського не знищили фізично, його почали нищити морально, він став «опальним академіком».

І все ж знадобився вчений в часі, коли приєднали Західну Україну до Радянської України. Його послали до Львова як живий доказ високого рівня радянської науки. Там йому влаштували гучне всенародне відзначення 70-ліття. 15 січня 1941 року нагородили орденом Трудовою Червоного Прапора.

Але вже через півроку, 20 липня 1941 року, академіка Агатангела Кримського безпідставно заарештували і відправили до в'язниці в далекий Казахстан. Там він і загинув у тюремній лікарні 25 січня 1942 року в місті Кустанай.

Вченого було реабілітовано у 1957 році.

Степан Смаль-Стоцький
(9.01.1859 – 17.08.1938)

член Історико-філологічного відділу (I Відділ)

Народився Степан Смаль-Стоцький 9 січня 1859 року у селі Немилові на Галичині в селянській родині.

З 1865 року навчався у сільській школі, 1867 року – вступив до третього класу

«тривіальної» школи в Радехові. Один рік відвідував «нормальну» школу у Львові, і лише 1869 року його прийняли до бурси при Ставропігійському інституті й записали до Академічної гімназії. У 1878-84 роках навчався спочатку в Чернівецькому університеті – на філологічному факультеті, а далі – у Віденському, де і захистив ступінь доктора слов'янської філології.

З 1885 року – професор української та російської мови і літератури у Чернівецькому університеті.

1885 року очолив кафедру, якою керував до серпня 1914 (формально – до листопада 1918 року). Кілька років був деканом філологічного факультету, заступав ректора, був дійсним членом НТШ (з 1899 року), депутатом австрійського парламенту.

З 1892 по 1897 роки редагував газети «Буковина» і «Руська Рада».

Під час Першої світової війни вів просвітницьку роботу в таборі українських полонених у Німеччині як діяч Союзу Визволення України.

1917 року Смаль-Стоцький – голова Бойової Управи Січових Стрільців, 1919 – посол ЗУНР у Празі. Перебував під наглядом радянської розвідки.

Став одним з перших 12-ти дійсних членів Академії наук, історико-філологічного відділу, і членом правління Академії.

1928 року вченого було перезатверджено у складі дійсних членів ВУАН. Від того часу ім'я академіка Степана Смаль-Стоцького не згадувалося в документах ВУАН.

1921 року почав працювати в Українському вільному університеті у Празі, був серед фундаторів університету, викладачем на філософському факультеті. Восени 1921 року його обрали деканом цього факультету. Водночас викладав українську мову у Варшавському університеті.

Був першим головою Української Могилансько-Мазепинської академії наук, наукової установи, заснованої в травні 1938 року постановою Уряду УНР в екзилі.

Помер Степан Йосипович Смаль-Стоцький 17 серпня 1938 року у Празі.

Микола Петров
(12.04.1840 – 20.06.1921)

член Історико-філологічного відділу (I відділ)

Народився Микола Петров 12 квітня 1840 року у с. Вознесенське Макаріївського повіту Костромської губернії у багатодітній родині дяка.

Освіту отримав спочатку у Макаріївському духовному училищі (1850–56), згодом у Костромській духовній семінарії (1856–60). У 1861–65 рр. навчався у Київській духовній академії.

Згодом призначений викладачем словесності і латинської мови у Волинську духовну семінарію.

У 1865 році були опубліковані його дослідження літературної спадщини Феофана Прокоповича та Митрофана Довгалевського.

1868 р. одержав Євгенієво-Рум'янцевську премію за дослідження «Про словесні науки та літературні заняття у Київській академії від початку її до перетворення в 1819 році».

З 1870 року – викладач Київської духовної академії (КДА), згодом доцент, а з вересня 1871 р. – екстраординарний професор кафедри теорії словесності та історії російської літератури.

1873 р. – обраний членом Ради Київської духовної академії.

За його ініціативи відкрито Товариство Нестора Літописця.

1875 року захищає дисертацію «Про походження слов'яно-російського „Прологу“» і отримує ступінь доктора богослов'я.

24 вересня 1896 року обраний на посаду ординарного професора.

У 1878–1919 рр. очолював Церковно-археологічний музей при КДА.

У 1884–1887 рр. редагував «Київські єпархіяльні відомості».

10 травня 1907 року Рада Харківського університету надала йому ступінь доктора російської мови і словесності.

З 1911 р. – дійсний член НТШ.

З 1914 р. – почесний член Казанської духовної академії, з 1916 р. – член-кореспондент Петроградської АН, почесний член Московської духовної академії.

14 листопада 1918 р. обраний дійсним членом УАН Історико-філологічного відділу.

Автор «Нарисів з історії української літератури XVIII ст.» (1880), «Нарисів з історії української літератури XIX ст.» (1884). Досліджував творчість Сквороди і Котляревського, історію Київської академії. Розглядав українську літературу як «самодостатню галузь».

В етнографічних працях наголошував на важливості українського елемента у ранніх творах М. Гоголя.

Монографії: «Холмская Русь» (1887), «Волинь» (1888), «Бессарабия» (1894).

Помер 20 червня 1921 року, похований на Байковому цвинтарі, за іншими даними – біля Київського Свято-Флорівського Вознесенського монастиря.

Орест Левицький

(25.12.1848 – 9.05.1922)

член Історико-філологічного відділу (I Відділ)

Народився Орест Левицький 25 грудня 1848 року у с. Маячці Кобеляцького повіту на Полтавщині у родині давнього священницького роду.

З 9-ти років навчався у приватній школі, а невдовзі – у Полтавському духовному училищі.

1869 року закінчив семінарію і вступив на історико-філологічний факультет Київського університету.

1874 року закінчує навчання і працює викладачем у гімназіях Києва, секретарем-діловодом у Київській комісії для розгляду давніх актів.

Досліджував і публікував архівні матеріали до історії України XVI–XVIII століть, готує до видання «Літопис Самовидця».

У листопаді 1918 року Левицький стає академіком УАН, а згодом (1919–1921) в.о. президента, головою Соціально-економічного відділу та Комісії по виучуванню народного права.

Праці: «Нарис внутрішньої історії Малоросії у другій половині XVII ст.» (1874–75), «Спроба дослідження Літопису Самовидця» (1878), «Шлюб на Русі-Україні в XVI–XVII ст.».

Автор численних історичних описів з життя Волині XVI століття, а також часів Гетьманщини XVII ст., які друкував переважно у «Київській старині».

Виконував обов'язки президента УАН, коли з Києва виїхав В. Вернадський, а у березні 1922 року обраний на посаду президента.

9 травня 1922 року Орест Левицький помер, перебуваючи на Драбівському дослідному полі. Похований у сусідньому селі Митлашівка, за козацьким звичаєм. У 80-х роках церкву розвалили бульдозерами, зникла і могила вченого, але 1989 року її вдалося відновити.

Михайло Туган-Барановський

(20.01.1865 – 21.01.1919)

голова Відділу соціальних наук (III Відділ)

Народився Михайло Туган-Барановський 20 січня 1865 року в селі Солоному Куп'янського повіту на Харківщині у дворянській родині. Рід по батьківській лінії походить з татарських поселенців XIV в. у Литві (повне прізвище – Туган-Мірза-Барановський), мати – українка з Полтавщини.

Початкову освіту отримав удома, потім навчався у I-й Київській та II-й Харківській класичних гімназіях.

З 1884 року – студент природничо-математичного, а згодом правничо-економічного факультету Харківського університету, доповнював студії у Англії (1892).

У 1894 опублікував працю «Промислові кризи у сучасній Англії, їхні причини та вплив на народне життя», за яку здобув у Московському університеті ступінь магістра політичної економії.

1895 року – приват-доцент політекономії Петербурзького університету. Цього ж року вступив до Вільного економічного товариства (з 1896 – його голова).

1899 року – звільнений за «вільнодумство».

1898 року написав працю «Російська фабрика у минулому і нині», за яку отримав докторат Московського університету.

У 1901–1905 роках – перебуває на Полтавщині, бере участь у суспільному житті.

З 1905 року – знову приват-доцент Петербурзького університету, одночасно професор економічного факультету Петербурзького політехнічного і комерційного інститутів, а також приватного університету Шанявського у Москві.

Праці: «Нариси з історії політичної економії» (1901–1902), підручник для вищої школи «Основи політичної економії» (1-ше вид. – 1907, 5-е – 1924, укр. мовою – 1905), «Соціально-економічні ідеали нашого часу» (1913).

З 1906 року – головний редактор журналу «Вісник кооперації», редагує видання «Нові ідеї в економіці», видає книгу «Соціальні основи кооперації» (1916).

У 1914–16 роках спільно з М. Грушевським працював над енциклопедичним довідником «Український народ в його минулому і сьогоденні» (вийшло два томи).

У вересні–грудні 1917 року обіймав пост генерального секретаря фінансів Центральної Ради.

Читав лекції у Київському університеті, редагував журнал «Українська кооперація», очолював Українське товариство економістів.

З листопада 1918 року – дійсний член Української академії наук, очолив соціально-економічний відділ, перший керівник Інституту кон'юнктури.

На початку 1919 року за направленням Директорії у складі української дипломатичної місії перебував на Паризькій мирній конференції, де вирішувалася доля Європи після Першої світової війни.

Несподівано помер від серцевого нападу у потязі 21 січня 1919 року, похований в Одесі.

Федір Тарановський
(24.05.1875 – 23.01.1936)

член Відділу соціальних наук (III Відділ)

Народився Федір Тарановський у м. Плонськ Варшавської губернії у польсько-російській дворянській родині.

Закінчив гімназію у Варшаві.

1891 року вступив на юридичний факультет Імператорського Варшавського університету, який закінчив 1896 року і був залишений на кафедрі історії руського права.

У 1902–1903 роках – стажувався у Німеччині в університетах Гайдельберга, Геттінгена і Берліна.

1904 року – публікує монографію «Юридичний метод у державній науці. Нарис розвитку його в Німеччині».

1905 року – захищає у Петербурзі дисертацію і отримує ступінь магістра державного права.

1906 року – викладає у Демидівському юридичному ліцеї у м. Ярославлі.

1908 року – екстраординарний професор кафедри історії руського права в Дерптському (Юрїївському) університеті.

1911 року – захищає докторську дисертацію у Санкт-Петербурзькому університеті.

У 1912–1917 рр. займає посаду ординарного професора кафедри руського права Дерптського університету.

З 1918 року – професор і декан юридичного факультету Катеринославського університету.

14 листопада 1918 року обраний дійсним членом першого складу УАН у Соціально-економічному відділі. Згодом став головою кафедри порівняльної історії права, секретарем відділу, а з 15 березня 1919 року – головою Соціально-економічного відділу. Викладав у Харківському і Таврійському університетах.

З 1920 року – у еміграції у Королівстві сербів, хорватів і словенців, професор Белградського університету, член Сербської академії наук.

1922 року вийшло 2-е видання його «Учебника енциклопедии права».

З 1928 року працював ще й у Російському науковому інституті у Белграді.

Головні праці: «Огляд пам'ятників магдебурзького права західноруських міст Литовської епохи» (1897), «Феодалізм в Росії. Критичний огляд» (1902), «Нариси з історії державного права Речі Посполитої XVII ст.».

У 1931–1935 роках були надруковані чотири томи фундаментальної праці вченого «Історія сербського права в державі Неманичів».

1933 року Тарановського обрано академіком Сербської королівської АН. Був членом-кореспондентом Болгарської академії наук,

Слов'янського інституту у Празі, дійсним членом Польського наукового товариства у Львові.

Раптово помер 23 січня 1936 року, похований на Новому цвинтарі в Белграді.

Володимир Косинський
(13.08.1864 – 5.11.1938)

член Відділу соціальних наук (III Відділ)

Народився Володимир Косинський 13 серпня 1864 року у селі Дорошівка Глухівського повіту Чернігівської губернії, нині село Ямпільського району Сумської області, в заможній дворянській родині.

1883 року закінчив Новгород-Сіверську гімназію. Вищу освіту здобував на фізико-математичному факультеті Московського університету, який закінчив 1887 року. Водночас склав екстерном іспити за повний курс юридичних наук.

Спочатку працював учителем математики в гімназіях, у 1892–94 – професорський стипендіат кафедри політекономії і статистики Московського університету.

У 1895–97 роках – наукове відрядження за кордон (Париж, Лондон, Берлін, Дрезден).

З 1900 року – приват-доцент кафедри політичної економії і статистики Московського університету.

1901 року – захистив дисертацію і обраний 1902 року на посаду ад'юнкт-професора Ризького політехнічного інституту.

На цьому етапі наукової діяльності стає провідним фахівцем у галузі політекономії, фінансів і економіки сільського господарства, висловлює ідею організації інституту земських інженерів.

У 1904 році обіймає професорську посаду в Новоросійському університеті, 1907 року захищає докторську дисертацію, а 1909 – стає ординарним професором кафедри політичної економії при сільськогосподарському відділенні Київського політехнічного інституту.

У 1913–14 роках перебував у наукових відрядженнях до Німеччини, Австрії та Швейцарії.

У часи революції спершу був членом Центральної Ради, згодом входить до Комісії з

випрацювання законопроекту про заснування Української академії наук.

14 листопада 1918 року його призначили академіком УАН, одночасно він увійшов до гетьманського уряду, спочатку як заступник міністра праці, а згодом як міністр праці.

За часів Директорії змушений був переходитися.

З 1919 року (після клопотань А. Кримського та В. Вернадського перед головою РНК УСРР Х. Раковським) професор Косинський повернувся до праці в УАН та Київському політехнічному інституті.

З грудня 1919 року по березень 1921 року Косинський перебував в Одеському політехнічному інституті на посаді штатного професора статистики.

1921 року – читає лекції у Кам'янець-Подільському інституті народної освіти. Цього ж року емігрує до Варшави, де став головою Російської академічної групи у Польщі.

1922 року – обраний професором Російського народного університету і Російського юридичного факультету у Празі, читав лекції у Вищому комерційному інституті та Російському інституті сільськогосподарської кооперації в Празі й Українській господарській академії в Подєбрадах (Чехословаччина).

З 1928 року – професор кафедри політичної економії Латвійського університету. Цього ж року виключений зі складу ВУАН.

З 1931 викладав у Російському інституті університетських знань у Ризі.

Основні праці з проблем розвитку поміщицьких і селянських господарств, земельної ренти, кооперації, наприклад, «Українська кооперація» (1918–19).

Помер Володимир Косинський 5 листопада 1938 року. Похований на Покровському кладовищі в Ризі.

З часу заснування Національної академії наук України минає 100 років. Імена перших її дійсних членів нині практично забуті і незнані, хіба за винятком Володимира Вернадського та Агатангела Кримського. Багатьох імен не знайдено ні в довідниках та енциклопедіях радянської доби, ні в сучасних, які вийшли за часів незалежності України. Їхні

імена свідомо вилучалися з наукових джерел, а наукова спадщина потрапляла у забуття.

Вони варті того, щоб згадати їх у ювілейний сотий рік нинішньої Національної академії наук України.

Список використаної літератури

- [1]. Shenderovskiy Vasyl. Nekhai ne hasne svit nauky. Kyiv: «Rada», 2003. 416 s.
[2]. Shenderovskiy Vasyl. Nekhai ne hasne

svit nauky. Kn. . Kyiv: «Rada», 2006. 328 s.

- [3]. Shenderovskiy Vasyl. Nekhai ne hasne svit nauky. Kn. 3. Kyiv: VD «Prostir», 2011. 344 s.
[4]. Shenderovskiy Vasyl. Nekhai ne hasne svit nauky. Kn. 4. Kyiv: VD «Prostir», 2017. 336 s.

Стаття надійшла до редакції 17.09.2018 р.

UDC 061.12.044.2

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150482>

FROM THE HISTORY OF UKRAINIAN ACADEMY OF SCIENCES (TO THE 100TH ANNIVERSARY OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE)

V. A. Shenderovskiy

Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, ave. Nauky, 46, Kyiv, 03028,
(schender@iop.kiev.ua, (044) 525-07-77)

Summary

In this investigation, we have the purpose to present at least some brief informations about the fate of scientists, whose achievements laid the foundations of the Ukrainian Academy of Sciences.

The paper contains short sketches of the lifes and activity of scientists, whose scientific achievements have been steadily underpinned by the Ukrainian Academy of Sciences. The names of the first full members of the UAN (most of them) were practically forgotten and removed from encyclopaedic books of the Soviet period, and their scientific heritage fell into oblivion.

On November 14, 1918, Ukrainian Government by the particular law founded the Ukrainian Academy of Sciences. Also, the Government has appointed first academicians on November 14, namely, only 12 full members. According to the proposed statute, the full members of the UAN could be not only citizens of the Ukrainian State, but also Ukrainian scientists of Western Ukraine, as well as foreigners, by the consent of two thirds of the full members of the UAN. On November 27, 1918, the first meeting of the supreme body of the newly formed academy took place.

The first three departments of the Academy were approved: Historical-Philological, Physical-Mathematical and Social Sciences, including 3 institutes, 15 commissions and a national library.

Since the formation of the Ukrainian Academy of Sciences, 100 years have passed. The names of its first members are now practically forgotten and unknown, may be, except for Wolodymyr Wernadsky and Agathangel Krymsky. You will not find many names in reference books or encyclopaediae of the Soviet period, nor in modern ones published during the restored independency of Ukraine. Their names were deliberately removed from scientific sources, and their scientific heritage fell into oblivion.

They are worth mentioning in the jubilee hundredth year of the modern Ukrainian National Academy of Sciences.

Keywords: academy, department, education, scientific work

УДК 061.12.044.2

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150482>

З ІСТОРІЇ УКРАЇНСЬКОЇ АКАДЕМІЇ НАУК (ДО 100-РІЧЧЯ НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ)

В. А. Шендеровський

Інститут фізики НАН України, просп. Науки, 46, Київ, 03028,
schender@iop.kiev.ua, (044) 525-07-77

Реферат

Мета нашої розвідки – подати бодай стисло інформацію про долю вчених, науковими доробками яких закладено підвалини Української академії наук.

У роботі подано коротку інформацію про долю вчених, на наукові доробки яких зіперто основи Української академії наук. Імена перших дійсних членів УАН (більшість з них) було практично забуто й вилучено з енциклопедичних довідників радянської доби, а наукова спадщина потрапила у забуття.

14 листопада 1918 року законом українського уряду було засновано Українську академію наук. Перших академіків було призначено постановою уряду 14 листопада, всього 12 дійсних членів. Згідно зі запропонованим статутом, дійсними членами УАН могли бути не лише громадяни Української Держави, а й українські вчені Західної України, а також чужинці за згодою двох третин дійсних членів УАН. 27 листопада 1918 року відбулося перше засідання вищого органу новоствореної академії.

Було затверджено й перші три відділи академії: Історико-філологічний, Фізико-математичний і Відділ соціальних наук, які охоплювали 3 інститути, 15 комісій і національну бібліотеку.

З часу заснування Української академії наук минуло 100 років. Імена перших її дійсних членів нині практично забуті й неznані, хіба за винятком Володимира Вернадського й Агатангела Кримського. Багатьох імен не знайдеш ні в довідниках чи енциклопедіях радянської доби, ні в сучасних, які вийшли за часів незалежності України. Їхні імена свідомо вилучали з наукових джерел, а наукова спадщина потрапляла в забуття.

Вони варті того, щоб згадати їх у ювілейний сотий рік нинішньої Національної академії наук України.

Ключові слова: академія, відділ, освіта, наукова праця

ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

PACS numbers: 72.80.Ey, 85.30.-z, 85.30.De, 85.30.Tv, 85.40.-e
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150488>

ФІЗИКА НАНОТРАНЗИСТОРІВ: УСТРІЙ, МЕТРИКА ТА КЕРУВАННЯ

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

Одеський державний екологічний університет,
факультет комп'ютерних наук,
вул. Львівська, 15, Одеса, Україна

тел. (067) 725 2209, E-mail: kruglyak.yual@gmail.com

* Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
факультет радіофізики, електроніки і комп'ютерних систем,
пр. Глушкова, 4г, Київ, Україна, тел. (044) 526 0532;

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України,
пр. Науки, 41, Київ, Україна, тел. (044) 525 6033,
E-mail: maksym_strikha@hotmail.com

ФІЗИКА НАНОТРАНЗИСТОРІВ: УСТРІЙ, МЕТРИКА ТА КЕРУВАННЯ

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

Анотація. Транзистор є ключовим елементом практично будь-якого електронного приладу. До кінця 20 століття розміри польових транзисторів метал-діелектрик-напівпровідник (MOSFET) досягли наномасштабу, а сам нанотранзистор першим серед усіх нанорозмірних електронних пристроїв став об'єктом масового промислового виробництва. Сьогодні довжи-

на каналу провідності транзистора наблизилася до 10 нм, що на декілька порядків менше, ніж у перших MOSFET.

Завдання нашої нової серії методичних оглядових статей, орієнтованих на дослідників, студентів, аспірантів та викладачів вищої школи – обговорити фізичні моделі і принципи, що лежать в основі функціонування нанорозмірних MOSFET. Ці моделі засновані як на звичному традиційному підході «згори – вниз», так і на більш сучасному підході, що бере свій початок в роботах Рольфа Ландауера і був розвинутий Супрійо Датта і Марком Лундстромом.

Ключові слова: наноелектроніка, польовий транзистор, вольт-амперні характеристики, метрика транзисторів, керування транзисторами, віртуальний витік

PHYSICS OF NANOTRANSISTORS: STRUCTURE, METRICS, AND CONTROL

Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha

Abstract. The transistor is the key element of almost any electronic device. By the end of the 20th century, MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor) sizes had reached a nanoscale, and the nanotransistor itself was the first of all nanoscale electronic devices to be the object of large-scale industrial production. Today, the length of the conduction channel of the transistor has approached 10 nm, which is several orders of magnitude lower than in the first MOSFET.

The task of this new series of our tutorial reviews directed to serve researchers, university teachers and students, is to discuss the physical models and principles underlying the functioning of nanoscale MOSFETs and based both on the traditional «top – down» approach and on a more modern approach originating in the works of Rolf Landauer, developed later by Suprio Datta and Mark Lundstrom.

Keywords: nanoelectronics, field effect transistor, current-voltage characteristics, transistor metrics, transistor control, virtual source

ФИЗИКА НАНОТРАНЗИСТОРОВ: УСТРОЙСТВО, МЕТРИКА И УПРАВЛЕНИЕ

Ю. А. Кругляк, М. В. Стриха

Аннотация. Транзистор является ключевым элементом практически любого электронного прибора. К концу 20 века размеры полевых транзисторов металл-диэлектрик-полупроводник (MOSFET) достигли наномасштаба, а сам нанотранзистор первым среди всех наноразмерных электронных устройств стал объектом массового промышленного производства. Сегодня длина канала проводимости транзистора приблизилась к 10 нм, что на несколько порядков меньше, чем в первых MOSFET.

Задача нашей новой серии методических обзорных статей, ориентированных на исследователей, студентов, аспирантов и преподавателей высшей школы – обсудить физические модели и принципы, лежащие в основе функционирования наноразмерных MOSFET и основанные как на привычном традиционном подходе «сверху – вниз», так и

на более современном подходе, берущим свое начало еще в работах Рольфа Ландауэра, и развитом Суприо Датта и Марком Лундстромом.

Ключевые слова: наноэлектроника, полевой транзистор, вольт-амперные характеристики, метрика транзисторов, управление транзисторами, виртуальный источник.

1. Вступ

Винахід транзистора прийнято вважати одним із найбільших відкриттів 20 століття. Транзистори використовують в електронній схемі практично кожного електронного приладу. Мільярди транзисторів містяться в наших смартфонах і планшетах, у всіх найрізноманітніших гаджетах, в настільних комп'ютерах і в суперкомп'ютерах, без яких ми вже не можемо уявити собі 21 століття.

Польовий транзистор метал-діелектрик-напіпровідник (MOSFET, Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor) з погляду фізики його дії можна зобразити схемою, наведеною на рис. 1. Електрони в MOSFET рухаються від витoku S по провідному каналу й виходять зі стоку D . Струм через транзистор контролюється затвором G , який ізолювано від каналу провідності діелектричним прошарком, товщина якого в сучасних пристроях уже може бути меншою від 2 нм. Відбувається й мініатюризація пристрою в цілому: коли наприкінці 20 століття довжина каналу зазвичай складала близько 100 нм, то сьогодні – вже наближається до 10 нм.

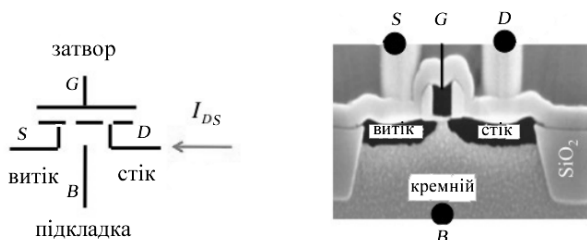


Рис. 1. Si-MOSFET: Ліворуч зображено прийняту в англomовній літературі схему транзистора з позначенням контактів – Витік S /Source, Стік D /Drain, Затвор G /Gate та підкладка B /Body; пунктирною лінією показаний струмопровідний канал. Праворуч наведено мікрограму перерізу MOSFET, отриману на сканувальному електронному мікроскопі, на якій добре видно всі контакти та діелектричний прошарок, який ізолює затвор G від каналу провідності

На рис. 2 зображено типову вольт-амперну характеристику (ВАХ) MOSFET, докладний опис якої буде здійснено далі, в розділі 5 цієї статті.

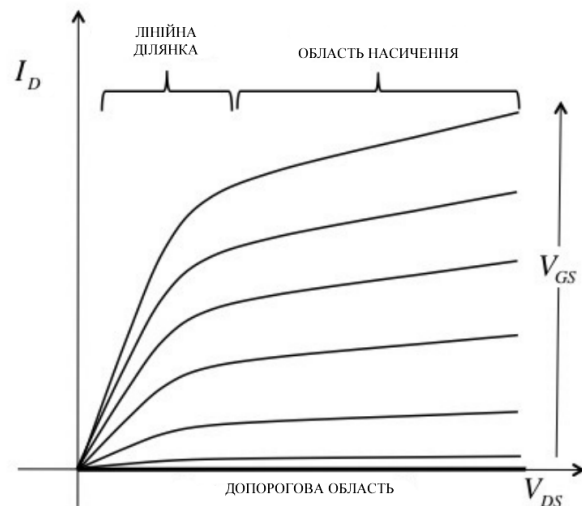


Рис. 2. Вольт-амперні характеристики n -MOSFET: по вертикальній осі відкладено струм електронів, який тече від витoku D до стоку S , а по горизонтальній осі – напругу поміж ними V_{DS} . Різні характеристики відповідають різним значенням напруги V_{GS} на затворі G . Показані дві важливі ділянки ВАХ для післяпорогової області напруг на затворі – лінійну ділянку та область насичення. Максимальна напруга між затвором G та стоком D – це напруга живлення V_{DD} . Невеликий струм витікання в допороговій області на лінійній ділянці в обраному масштабі не помітний.

Такий пристрій як MOSFET є ключовим елементом у багатьох електронних схемах. Він може виконувати роль цифрового комутатора (ON/OFF), аналогового посилювача вхідних сигналів, або ж забезпечувати інші функції.

2. Дещо з історії електроніки

Схема кожного електронного приладу містить взаємопов'язані компоненти та пристрої. Опори, конденсатори та дроселі – найпрості-

ші електронні компоненти. Проте, електроні схеми потребують так само нелінійних пристроїв. Найпростішим з них є діод, яких має різну провідність у залежності від напрямку електричного струму. Перші кристалічні детектори – кристали напівпровідника (тоді найчастіше сульфід кадмію) з притиснутим металічним вістря, які мали випрямляючі властивості – винайшов у 1874 році професор фізики Страсбурзького університету Карл Фердинанд Браун [1]. Співробітничавши з італійським інженером Гульєльмо Марконі, Браун через чверть століття застосував свій винахід для детектування радіосигналів. Запропоновані Марконі й Брауном детекторні приймачі (які потребували також антени, коливального контуру зі змінною частотою і навушників) швидко замінили перші примітивні приймачі з когерером, де проходження струму забезпечувалося спіканням під дією детектованої хвилі металевих ошурок у скляній ампулі – когерері (саме таку схему застосував для свого приймача в 1895 році російський інженер Микола Попов). У 1909 році Марконі й Браун стали лауреатами Нобелівської премії з фізики.

Проте детекторні приймачі були дуже капризні, під час передачі треба було весь час водити металічним вістря по кристалу, шукаючи точку з найкращою чутністю. Відтак їх скоро замінили приймачі з вакуумними ламповими детекторами, які містили катод прямого розжарювання, що емітував електрони у вакуум, й металевий анод, при прикладанні до якого позитивного потенціалу електрони з катоду переходили до аноду і протікав струм. При протилежній полярності напруги струм через систему не проходив. Перші сучасні вакуумні діоди сконструював у 1904 році англієць Джон Амброз Флемінг.

Невдовзі, в 1907 році, американець Лі де Форест вмістив поміж катодом та анодом металічну сітку. Подаючи на неї невеликий потенціал, можна було контролювати струм між анодом і катодом, посилюючи тим детектований сигнал. Так з'явився тріод. Широке застосування вакуумних ламп спричинило революцію в техніці, дозволило зробити ма-

совим радіозв'язок, а згодом і телебачення, уможливило створення у 1940-х роках перших комп'ютерів, розвиток яких стимулювала потреба швидких обчислень задач балістики та криптографії під час Другої світової війни. Однак і з вакуумними лампами існували серйозні проблеми – вони були громіздкі, крихкі й надто енерговитратні. Як наслідок, більшість часу при роботі перших комп'ютерів (які займали обсяг великої кімнати) витрачалася на те, щоб виявити лампу, що вийшла з ладу, й замінити її.

Відтак об'єктивно з'явилася потреба створення надійних, довговічних і менш енерговитратних твердотільних діодів та тріодів (що отримали назву транзисторів). Роботи в цьому напрямку розпочалися в США іще наприкінці Другої світової війни. Драматична історія появи транзисторів пов'язана з ім'ям американського вченого Вільяма Шоклі (1910 – 1989). Після війни він очолював у Бел Лабораторію фізики твердого тіла [1]. Завданням групи було отримати ефект посилення на напівпровідниках, щоб зробити посилювачі компактнішими й надійнішими.

Спершу Шоклі захопився ідеєю саме польового транзистора, зображеного на рис. 1, де провідність в каналі від витоків до стоку можна було б регулювати прикладенням напруги до затвору, і таким чином отримати необхідний ефект посилення: малий сигнал на затворі призводив би до великих змін струму в колі витік – стік. (Точно за такою схемою працювали вакуумні тріоди, де струм між анодом і катодом регулювався поданням невеликої напруги на проміжний електрод – сітку).

Проте реально на тогочасних погано виготовлених зразках реалізувати цю ідею не вдалося. Як з'ясував один із співробітників Шоклі, Джон Бардін, зовнішнє поле екранувалося великою кількістю носіїв, зв'язаних на енергетичних станах на поверхні, і фактично не проникало всередину. Так суто експериментальне завдання послужило поштовхом для створення сучасної квантово-механічної теорії поверхневих станів у напівпровідниках (1946).

Коли ж нарешті всі труднощі було подолано й перші експериментальні зразки польових транзисторів готові, виявилось, що ідею ще в 1925 році запатентував Юліус Лілієнфельд (1882 – 1963) – фізик, який народився у Львові, почав наукову кар’єру в Німеччині й продовжив її у США. Отриманий Лілієнфельдом патент виключав можливість комерційного використання ідеї Шоклі і його колег.

Відтак Джон Бардін разом з Волтером Браттейном зосередилися на ідеї створення транзисторів на точкових контактах, які вивчав ще Карл Фердинанд Браун. Цю ідею було практично реалізовано в грудні 1947-го – проте такі транзистори виявилися нетехнологічними й великого розповсюдження не отримали.

Натомість Шоклі вважав перспективним створення транзистора на двох $p-n$ -переходах (ефект випрямлення на напівпровідниковому $p-n$ -переході отримав у 1941 році в Києві експериментально український фізик Вадим Лашкар’юв, проте ця його робота лишалася на Заході невідомою [2]). Але для початку треба було зрозуміти, як саме носії заряду – електрони й дірки – рухаються й рекомбінують усередині напівпровідника. Шоклі розв’язав диференціальні рівняння для дифузійного й дрейфового руху носіїв, побудував модель рекомбінації через домішкові рівні (модель Шоклі – Ріда). Отримані ним результати лягли в основу фундаментальної монографії «Електрони і дірки в напівпровідниках» (1950).

Як наслідок цих зусиль, 1951 року схожі на триногих павучків перші напівпровідникові транзистори, в яких невеликою зміною напруги на базі можна було ефективно керувати струмом у колі «емітер – колектор», почали переможну ходу планетою, спричинивши справжню технологічну революцію. Компактні (порівняно з громіздкими ламповими попередниками) транзисторні радіоприймачі стали (разом з групою «Бітлз», чії пісні через ці приймачі лунали) одним із символів 1960-х років. У 1956 році Шоклі, Бардіну й Браттейну за винайдення транзистора було присудже-

но Нобелівську премію з фізики. У 2002 році Шоклі було посмертно названо «людиною, яка принесла кремній у Кремнієву долину».

У подальшому з розвитком технологій польові транзистори з контактом метал-напівпровідник, запатентовані Лілієнфельдом, у модифікації MOSFET, зображеній на рис. 1 (їх масове виробництво розпочалося в 1964 році), витіснили транзистори на двох $p-n$ -переходах, запропоновані Шоклі, і стали основним елементом кожного електронного пристрою [3]. Першу інтегральну мікросхему – два транзистори, опір і декілька конденсаторів – було зібрано 1959 року на одному кристалі кремнію діаметру 2 см фактично вручну. Нині на такій площі мікросхем розміщують уже 10^9 транзисторів. Ще в 1965 році колишній співробітник Шоклі, майбутній співзасновник компанії Intel Гордон Мур помітив, що число транзисторів у таких інтегральних схемах подвоюється з кожною новою технологічною генерацією (закон Мура) [4] – спочатку щорічно, а потім через кожні півтора року. Він передбачив, що таке подвоєння числа транзисторів у чипі збережеться й надалі ще протягом певного часу; але, напевно, він не міг припустити, що цей емпіричний закон діятиме впродовж півстоліття [5].

При цьому розміри транзисторів постійно зменшувалися. Коли вони сягнули наприкінці 1960-х – на початку 1970-х сотень, а потім і десятків мікронів, стали говорити про мікроелектроніку. Тоді ж фізики розробили прості математичні моделі транзисторів [6 – 9], які надійно описували всі їхні функції й були достатні для схемних та системних дизайнерів. Уточнення й дальший розвиток цих моделей відбувався разом із удосконаленням мікросистемних технологій [10, 11]. З кожною технологічною генерацією розміри транзисторів зменшувалися в $\sqrt{2}$ рази (тож площа, яку займає транзистор, зменшувалася в 2 рази, й число транзисторів у чипі подвоювалося). Перед 2000 роком довжина каналу провідності в транзисторах досягнула 100 нм , мікроелектроніка перетворилася на наноелектроніку, й нанотранзистор став символом нанотехно-

логічної революції. Упродовж двох подальших десятиліть довжину каналу провідності зменшили ще в 10 разів і ключове питання сьогодні звучить так: «Наскільки сучасна технологія дозволить зробити канал провідності коротшим від 10 нм?». Адже, хоча вже упродовж понад 10 років з'являються повідомлення про створення різними провідними фірмами дослідних зразків польових транзисторів з ізольованим затвором із довжиною каналу 5–7 нм, однак важливою перешкодою на шляху їх масового виробництва залишаються, зокрема, обмеження технології іонної імплантації. Ці обмеження ми обговоримо в наших наступних статтях.

Після переходу в нанодіапазон заміри електрофізичних характеристик нанотранзисторів суттєво не змінилися. Однак іншою стала фізика перенесення електронів від витoku до стоку. Наш методичний огляд буде присвячено викладу цієї нової фізики транспортних явищ у нанотранзисторах.

3. Про фізику нанотранзисторів

У переважній більшості різноманітних транзисторів їхню роботу контролює висота енергетичного бар'єру, яку можна змінювати шляхом прикладання напруги до затвору. Цей бар'єр перешкоджає рухові електронів від витoku до стоку. Зміною напруги V_{GD} між затвором G і стоком D можна змінювати висоту цього енергетичного бар'єру і таким чином контролювати струм через канал провідності транзистора.

Аналіз роботи MOSFET зазвичай починають з виразу

$$I_{DS} = W |Q(V_{GS}, V_{DS})| \langle v \rangle, \quad (1)$$

де W – ширина каналу провідності в напрямку, перпендикулярному до руху електронів, Q – рухливий електронний поверхневий заряд, $\langle v \rangle$ – середня швидкість руху електронів. Побудова математичної моделі роботи транзистора зводиться до фізичного опису електростатики (Q) й транспорту (v). На той час як

дизайн та опис електростатики транзистора мало змінилися протягом декількох останніх десятиліть, фізична природа й характер перенесення електронів зазнавали суттєвих змін мірою того, як довжина каналу провідності транзистора робилася все меншою й меншою.

Наріжним каменем традиційної фізики напівпровідників є рівняння дрейфу та дифузії

$$J_x = n_s q \mu E_x + q \bar{D} \frac{dn_s}{dx}, \quad (2)$$

яке стверджує, що густина струму в однорідному напівпровіднику в напрямку руху електронів пропорційна до електричного поля, а за відсутності поля струм визначають електрони, які дифундують назустріч градієнту концентрації електронів n_s ; тут q – величина заряду електрона, μ – рухливість електронів, \bar{D} – коефіцієнт дифузії. Хоча більшість підручників з фізики напівпровідників, починаючи з уже згаданої вище класичної праці Вільяма Шоклі, розпочинаються с рівняння (2), немає певності щодо того, що припущення, зроблені при виведенні цього рівняння, застосовні й щодо нанопровідників. Справді, напівкласичне [12] і квантове [13] моделювання показали, що транспорт електронів у нанорозмірних провідниках хоч і виявляється дуже складним явищем, але разом із тим простішим порівняно з транспортом у масивних провідниках.

Новий підхід до опису транспорту електронів, відомий як модель пружного резистора, було запропоновано Рольфом Ландауером ще в 1957 році [14], задовго до появи реальних нанопровідників. У цій моделі замість рівняння (2) струм обчислюється за формулою

$$I = \frac{2q}{h} \int T(E) M(E) (f_1(E) - f_2(E)) dE, \quad (3)$$

де $M(E)$ – число мод при значенні енергії E , доступних для провідності (докладніше про фізичний зміст цієї величини див. [15, 16]), $f_1(E)$ та $f_2(E)$ – рівноважні функції Фермі на витoku й на стоку, $T(E)$ – коефіцієнт проходження, який для балістичного режиму

провідності, коли електрон проходить канал без розсіювання, дорівнює 1, а для дифузійного зменшується зі збільшенням інтенсивності розсіювання [16]. Якщо дуже умовно порівняти канал провідності в нанотранзисторі з широкосмуговим автомобільним шосе, то число мод аналогічне до числа паралельних смуг руху на шосе, а коефіцієнт проходження лежить в області між нулем та одиницею, тобто є ймовірністю того, що електрон, інжектований у канал витоком, дійде до стоку. Для масивних провідників можна показати, що опис струму через вираз (3) і рівняння (2) призводить до тотожних результатів. Але важливо, що вираз (3) добре описує саме нанопровідники, для яких застосовність рівняння (2) не очевидна.

Раніше в журналі «Сенсорна електроніка і мікросистемні технології» ми вже надрукували дві серії статей, присвячені моделі пружного резистора Ландауера, розвиненій згодом у роботах Супрійо Датта і Марка Лундстрома. Перша серія відкривалася статтею [15], присвяченою основам фізики виникнення струму, формулюванню закону Ома і поняття мод провідності в концепції «знизу – вгору» побудови сучасної наноелектроніки. У першій статті другої серії [16] ми дали послідовний виклад основ моделі Ландауера – Датта – Лундстрома (ЛДЛ), яка вже знайшла широке застосування при аналізі як електронного, так і фононного транспорту в резисторах як нанорозмірних, так і довгих чи об'ємних.

При цьому розгляд у [16] здійснювався для випадку, коли температура контактів резистора однакова. У [17] натомість ми розглянули термоелектричні ефекти Зеєбека і Пельт'є в моделі ЛДЛ, а також якісно обговорили закон Відемана – Франца й основні рівняння термоелектрики з відповідними транспортними коефіцієнтами. Потому в [18] ми отримали доведення для результатів, постульованих у [16], причому зробили це для 1D, 2D і 3D провідників з довільним законом дисперсії і будь-яким режимом провідності: балістичним, дифузійним, або ж перехідним.

З позицій транспортної моделі Ландауера – Датта – Лундстрома у [19] побудовано уза-

гальнену модель переносу тепла фононами. У [20] ми розглянули, як узагальнена транспортна модель ЛДЛ описує провідність графену. Надалі, в [21] розглянули роль розсіювання в моделі ЛДЛ й продемонстрували, що при описі транспорту електронів у провіднику в дифузійному режимі важливу роль відіграє середня довжина вільного пробігу λ , яка визначає коефіцієнт проходження τ . Нарешті, в [22] було розглянуто кінетичне рівняння Больцмана (КРБ), яке в застосуванні до наноелектроніки розв'язує ті ж завдання, що й узагальнена транспортна модель ЛДЛ. Ми продемонстрували: для одних задач краще використовувати КРБ, а для других – модель ЛДЛ.

Статтю [23] було присвячено методам вимірювання провідності й ефекту Холла в слабких та сильних магнітних полях, зокрема й за наявності перепаду температур на контактах провідника. В заключній статті другої серії [24] ми розглянули явище кулонівської блокади в одноелектронному транзисторі на одній молекулі з позицій двох різних підходів: в концепції «знизу – вгору» сучасної наноелектроніки і, для порівняння, в традиційній концепції «згори – вниз» з застосуванням макроскопічних властивостей і понять, як-от ємність провідного каналу тощо.

Підсумовуючи наслідки розгляду, здійсненого нами в рамках моделі ЛДЛ [15 – 24], для нанотранзисторів, зазначимо: досі ми розглядали протікання струму лише напівкласично. Іншими словами, ми розглядали електрони лише як частинки, а їхню квантово-механічну природу враховували опосередковано через зонну структуру провідного каналу, запроваджуючи поняття ефективної маси електрона. Однак, із подальшим зменшенням довжини каналу провідності дедалі нагальнішою стає потреба в явному вигляді врахувати квантову природу електронів. Можна очікувати, що квантово-механічні ефекти стануть відігравати важливу роль тоді, коли потенціальна енергія почне суттєво змінюватися на масштабі де-бройлівської довжини хвилі електрона.

Проста оцінка де-бройлівської довжини хвилі електронів у термічно рівноважному

зразку Si дає значення близько 10 нм , що вже не набагато менше від реально досягнутої на практиці довжини каналу провідності при масовому виробництві нанотранзисторів. Як ми вже казали, протягом останніх двох десятиліть були розроблено надійні й потужні моделі квантового транспорту для нанопровідників (узагальнений виклад моделі ЛДЛ можна знайти, зокрема, в монографіях [25 – 27]). Ці моделі показують: при зменшенні довжини каналу порівняно з 10 нм дедалі важливіше в явному вигляді враховувати квантово-механічну природу транспорту електронів. Особливою проблемою є й квантові обмеження, які накладає товщина каналу провідності вглиб підкладки (для довжини каналу в 20 нм її характерне значення може становити близько 5 нм , й і квантові обмеження слід враховувати для опису величин потенціальних бар'єрів, які реалізуються в каналі). Однак у цілому, при довжині каналу провідності 10 нм і більше, як ми побачимо, напівкласична модель ще працює достатньо надійно [28].

4. Фізична структура MOSFET

Мета нашої нової серії статей – пояснити й математично описати фізику процесів, що відбуваються в транзисторі, тобто пов'язати струми, які протікають у транзисторі, з електричними потенціалами, що подаються на контакти (у сучасній літературі частіше вживають термін «термінали») транзистора (рис. 1). Для початку корисно розглянути транзистор як «чорну скриню», формалізовано, не заглиблюючись у фізику процесів, які в ньому відбуваються.

Струм, що протікає між терміналами S та D , контролюється електричним потенціалом, який подається на термінал G (рис. 1). У деяких варіантах транзисторів цей термінал може використовуватися для підведення струму. Іноді використовують і термінал B . Розроблено багато варіантів транзисторів [29], але всі вони мають здебільшого три, зрідка чотири термінали. Ці термінали можуть називатися по-різному залежно від типу транзистора.

Ми зосередимося на кремнієвих польових транзисторах Si-MOSFET і на польових транзисторах з високою рухливістю електронів III-V HEMT (High Electron Mobility Transistor), але розвинуті далі підходи застосовні до всіх типів польових транзисторів.

Спершу розглянемо устрій n -канального Si MOSFET. У кремнієвій пластині p -типу електричним полем формують канал провідності n -типу з двома омичними контактами витоку S та стоку D . Контактні області S та D сильно леговані донорними домішками. У провідному каналі n -типу рухається потік електронів від витоку й до стоку. У верхній частині пластини виготовляють омичний контакт затвору G . Аналогічний контакт виготовляють у нижній частині підкладки B .

У польовому транзисторі n -Si MOSFET каналним струмом керує електричне поле, яке виникає при прикладанні електричної напруги між затвором та стоком.

На рис. 3 зображено переріз і вигляд згори n -Si MOSFET.

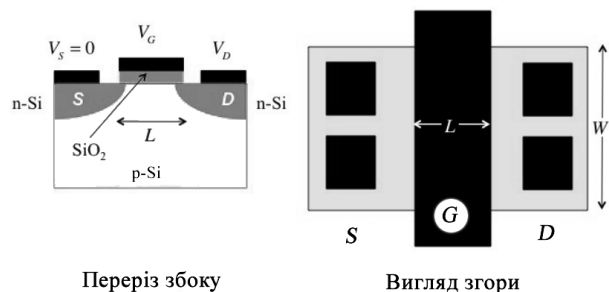


Рис. 3. n -канальний Si MOSFET: переріз (вигляд збоку) і вигляд згори. Схематично зображено контакти витоку та стоку (чорні квадрати) та затвору (чорний прямокутник).

Під металічним контактом затвору міститься тонкий шар діелектрика SiO_2 , а під ним – вузький проміжок Si p -типу. Довжина каналу провідності є критичним параметром транзистора, вона ж визначає фактичний розмір транзистора на чипі й швидкість роботи транзистора: чим менша, тим більша ця швидкість. Ширина каналу провідності визначає величину струму в каналі. Для кожної технологічної генерації виробництва транзисторів значення та проектують

таким чином, щоб функціонування транзистора було максимально ефективним.

В *n*-каналному MOSFET струм забезпечують електрони в зоні провідності кремнію. Як зображено на рис. 4, можна створити аналогічний *p*-каналний MOSFET, провідність якого також забезпечують електрони, але в валентній зоні, які зазвичай візуалізують як «дірки» в валентній зоні. *p*-Канальний MOSFET конструюють на *n*-Si підкладці. Контактні області *S* та *D* сильно легують акцепторною домішкою. Звернімо увагу, що $V_{DS} < 0$ для *p*-MOSFET і що потрібно прикласти $V_{GS} < 0$, щоб перевести *p*-MOSFET у режим «ON». Струм при цьому інjektується зі стоку, а не протікає в бік стоку, як у *n*-MOSFET. Сучасну електроніку сконструйовано за технологією CMOS (Complementary MOS – КМДН / комплементарна метал-діелектрик-напівпровідник структура), у якій кожний *n*-транзистор спарено з *p*-транзистором.

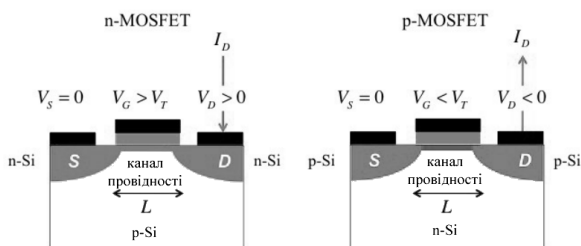


Рис. 4. Порівняння *n*-MOSFET та *p*-MOSFET. Звернімо увагу, що для *n*-MOSFET $V_{DS}, V_{GS} > 0$, а для *p*-MOSFET $V_{DS}, V_{GS} < 0$. Струм протікає від *D* до *S* у випадку *n*-MOSFET і від *S* до *D* у випадку *p*-MOSFET.

У прикладній схемотехніці транзистори зазвичай конфігурують так, щоб вони сприймали вхідну напругу й працювали за визначеної вихідної напруги. Вхідну напругу вимірюють між двома вхідними терміналами, а вихідну напругу – між двома вихідними терміналами (див. рис. 3). Вхідний струм – це струм, який входить в один із двох вхідних терміналів і виходить із другого вхідного терміналу, а

вихідний струм – це струм, який входить в один із двох вихідних терміналів і виходить з другого вихідного терміналу. В схемотехніці, за домовленістю, струм вважають додатнім, якщо він входить у термінал, тож струм витоку в *n*-MOSFET (рис. 4) додатний, а струм витоку в *p*-MOSFET від’ємний. Оскільки ми можемо використовувати тільки три термінали (термінал підкладки *B* особливий, він дозволяє налаштовувати операційні характеристики транзистора), то один з терміналів повинен бути з’єднаний або із входом, або з виходом. Існують три можливі схеми вмикання транзистора – зі спільним витокком, зі спільним стоком, та зі спільним затвором.

На рис. 5 зображено *n*-MOSFET, ввімкнений за схемою зі спільним витокком.

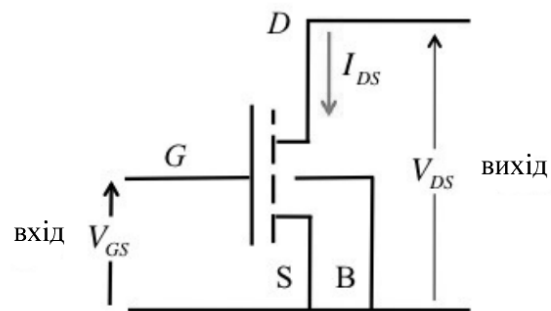


Рис. 5. *n*-MOSFET, ввімкнений за схемою зі спільним витокком.

Вхідна напруга тут V_{GS} , а вихідна – V_{DS} .

Вихідний струм I_{DS} , а струм затвору зазвичай дуже малий, тож вхідний сталий струм вважаємо нульовим.

У цьому випадку сталим вихідним струмом є струм від стоку до витокку I_{DS} , а сталою вихідною напругою є напруга між стоком та витокком V_{DS} . Сталою вхідною напругою є напруга між затвором та витокком V_{GS} . Сталий вхідний струм зазвичай дуже малий і ним, як правило, нехтують.

Нас у першу чергу цікавлять вольт-амперні характеристики (ВАХ) транзисторів. Особливо цікаві два типи ВАХ: вихідні та передавальні характеристики. Для побудови вихідних ВАХ відкладають залежність вихідного струму I_{DS} від вихідної напруги V_{DS} при

сталому значенні вхідної напруги V_{GS} . Для побудови передавальних ВАХ відкладають залежність вихідного струму I_{DS} від вхідної напруги V_{GS} при сталій вихідній напрузі V_{DS} .

5. Вольт-амперні характеристики

На рис. 6 зображено ВАХ ідеального резистора. В цьому випадку струм пропорційний прикладеній напрузі $I = V/R$, де R – опір резистора.

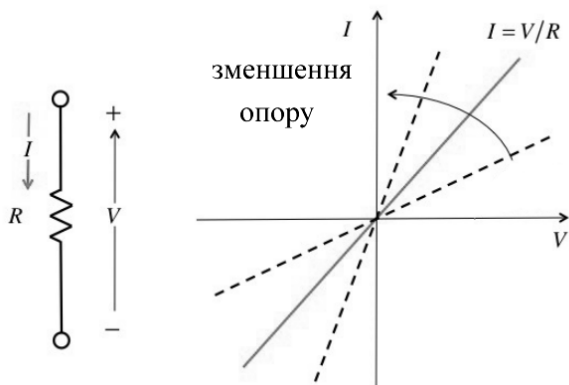


Рис. 6. Вольт-амперна характеристика ідеального резистора.

На рис. 7 зображено ВАХ джерела струму.

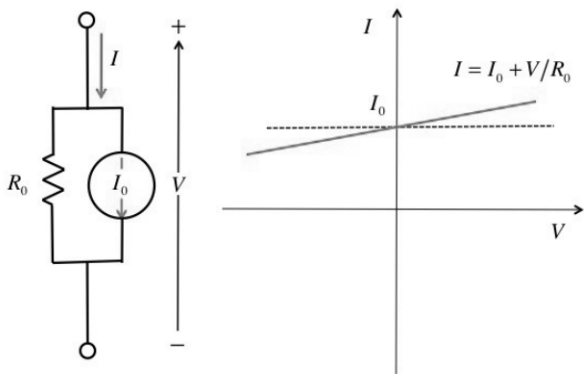


Рис. 7. Вольт-амперна характеристика джерела струму. Коли струм не залежить від напруги, його величина стала (пунктирна лінія). В реальних джерелах струму спостерігається залежність струму від напруги, що еквівалентно ввімкненню резистора паралельно до джерела струму.

Як видно з рис.2, вихідні ВАХ n -MOSFET при невеликих значеннях вихідної напруги V_{DS} виглядають як ВАХ для ідеального резистора (рис.6), а при великих значеннях V_{DS} – як ВАХ для джерела струму (рис.7). Кожна залежність на рис.2 відповідає певному значенню V_{GS} . Для V_{DS} , меншого від певного критичного значення V_{DSAT} , струм пропорційний до напруги. В цій лінійній (омічній) області транзистор поводить себе як резистор, опір якого визначається вхідною напругою V_{GS} .

Натомість в області $V_{DS} > V_{DSAT}$ (область насичення) транзистор поводить себе як джерело струму, сила якого теж визначається значенням V_{GS} . Струм дещо збільшується зі збільшенням V_{DS} , що еквівалентне тому, що це джерело струму характеризується скінченим значенням вихідного опору.

Третя область функціонування транзистора – це допорогова область, для якої V_{GS} менше від певного критичного значення, т.з. порогової напруги V_T . Для $V_{GS} < V_T$ струм I_{DS} дуже невеликий і його не видно на лінійній ділянці в обраному на рис. 2 масштабі.

На рис. 8 порівняно вихідні й передавальні ВАХ для n -MOSFET. Вихідні характеристики зображено ліворуч. Зафіксуємо певне невелике значення V_{DS} в лінійній області, яке дорівнює V_{DS1} , і «проженемо» струм I_{DS} за всіма відповідними значеннями V_{GS} . Це нам дасть передавальну ВАХ, позначену V_{DS1} на графіку праворуч. Якщо ми візьмемо вже більше значення V_{DS} в області насичення, яке дорівнює $V_{DS2} > V_{DS1}$, то одержимо передавальну характеристику, позначену V_{DS2} . З правої частини рис.8 видно, що при $V_{GS} < V_T$ струм I_{DS} дуже малий.

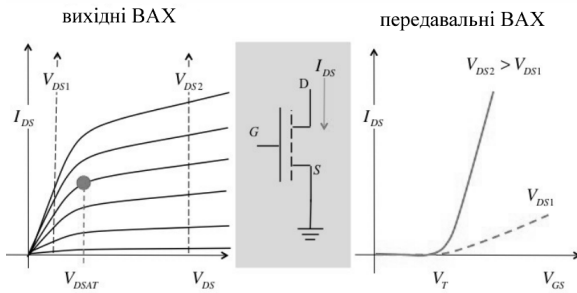


Рис. 8. Порівняння вихідних ВАХ *n*-MOSFET, ввімкненого за схемою зі спільним витоком (ліворуч) з передавальними ВАХ цього ж транзистора (праворуч). Крива, позначена V_{DS} праворуч, відповідає невеликому значенню V_{DS} в лінійній області на графіках ліворуч, а позначена V_{DS} – більшому значенню V_{DS} в області насичення.

Як ми покажемо далі, для аналізу струму I_{DS} в області $V_{GS} < V_T$ (рис. 8, праворуч) з міркувань зручності зазвичай використовують графік $\log_{10} I_{DS} \propto V_{GS}$ (рис. 11).

6. Метрика MOSFET

Функціонування MOSFET можна описати десятьма метричними показниками:

Струм I_{ON} , $\mu A/\mu m$

Лінійний опір R_{ON} , $Om \cdot \mu m$

Вихідний опір r_d , $Om \cdot \mu m$

Транспровідність g_m , $\mu Cm/\mu m$

Струм I_{OFF} , $\mu A/\mu m$

Допороговий розкид (Subthreshold Swing)

SS , $mB/декада$

Зниження бар'єру, індуковане стоком (Drain-Induced Barrier Lowering),

$DIBL$, mB/B

Порогові напруги $V_T(lin)$, $V_T(sat)$, B

Напруга насичення на стоку V_{DSAT} , B

Найчастіше використовують саме наведені вище одиниці вимірювання. Наприклад, транспровідність зазвичай наводять не в стандартних одиницях системи СІ Cm/m , а в значно наочніших для наномасштабів одиницях mCm/mkm або mCm/mm . Звернімо також увагу на те, що, говорячи у цих термінах про струм, ми фактично маємо на увазі густину струму на одиницю ширини каналу провідності.

Деякі з метричних показників транзистора можна проілюструвати на вихідних характеристиках *n*-MOSFET, ввімкненого за схемою зі спільним витоком (рис. 9). Струм I_{ON} – це максимальний струм витоку (а точніше – максимальна густина струму) $I_{DS}|_{V_{GS}=V_{DS}=V_{DD}}$. Струм I_{DS} зазвичай характеризують саме через його густину в $\mu A/\mu m$ (або $mA/\mu m$), оскільки повний струм лінійно збільшується з шириною каналу провідності. Лінійний опір – це мінімальний опір каналу провідності $R_{ON} = (dI_{DS}/dV_{DS})_{V_{GS}=V_{DD}}^{-1}$. Вихідний опір обчислюють аналогічно: $r_d = (dI_{DS}/dV_{DS})_{V_{GS}=V_{DD}}^{-1}$, але вже в області насичення. Транспровідність $g_m = (dI_{DS}/dV_{GS})_{V_{DS}=Const}$ зазвичай наводять для значення $V_{DS} = V_{DD}$. Щоб отримати істинні значення струму стоку й транспровідності, їх потрібно помножити ще на ширину $W(\mu m)$, а для істинних лінійного й вихідного опорів транзистора ділимо їх на ширину $W(\mu m)$.

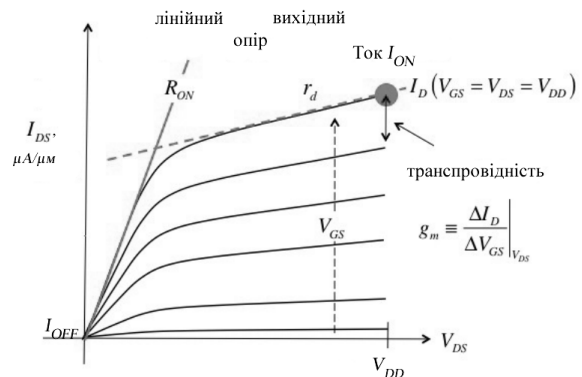


Рис. 9. Вихідні характеристики *n*-MOSFET, ввімкненого за схемою зі спільним витоком, з демонстрацією чотирьох метрик I_{ON} R_{ON}

Ще три метрики можна проілюструвати на передавальних характеристиках *n*-MOSFET, ввімкненого за схемою зі спільним витоком (рис. 10). Показано дві різні характеристики – для низьких напруг V_{DS} (лінійна область) й для високих V_{DS} (область насичення). Позначено також струм I_{ON} показаний на рис. 9. Якщо визначити максимальний нахил обох характеристик і точки перетину відповідних

прямих (їх зображено пунктиром) з віссю напруг, то знайдемо порогову напругу V_T . Звернімо увагу, що існують дві порогові напруги: одна відповідає лінійній (омічній) області $V_T(\text{lin})$, а друга – області насичення $V_T(\text{sat})$, причому $V_T(\text{sat}) < V_T(\text{lin})$. Відзначмо також, що перехід $I_{OFF} \Rightarrow I_{ON}$ відбувається поступово й точка, в якій цей перехід завершується, і є порога напруга V_T . Нарешті, струм $I_{OFF} = I_{DS}|_{V_{GS}=0, V_{DS}=V_{DD}}$ фактично також показано на рис. 10, але він занадто малий, щоб його можна було бачити в обраному масштабі.

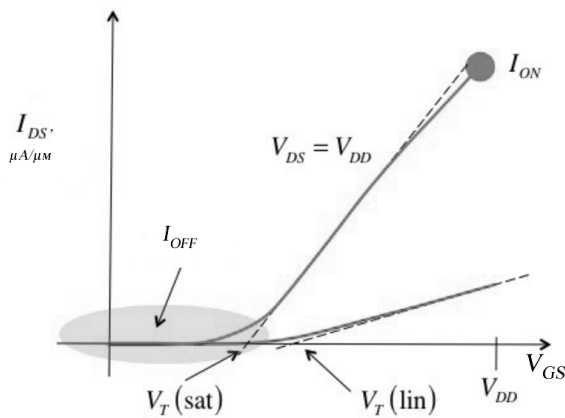


Рис. 10. Передавальні характеристики n -MOSFET, ввімкненого за схемою зі спільним витоком, з демонстрацією трьох метрик I_{OFF} , $V_T(\text{lin})$, $V_T(\text{sat})$.

Унаочнити допорогові характеристики зручніше, якщо відкладати вихідний струм I_{DS} у логарифмічній шкалі, як це зображено на рис. 11. Обидва струми $I_{OFF} = I_{DS}|_{V_{GS}=0, V_{DS}=V_{DD}}$ та $I_{ON} = I_{DS}|_{V_{GS}=V_{DD}, V_{DS}=V_{DD}}$ також зображено на цьому рисунку. Допороговий струм MOSFET зростає експоненційно з V_{GS} (рис. 10). Допороговий розкид SS визначається виразом

$$SS = [d(\log_{10} I_{DS})/dV_{GS}]^{-1} \quad (4)$$

і зазвичай його наводять у $mB/\text{декада}$. Допороговий розкид – це така зміна напруги на затворі (зазвичай у mB), яка призводить до зміни струму I_{DS} в 10 разів. Чим менший SS , тим менша напруга на затворі потрібна для

перемикання транзистора з режиму «OFF» у режим «ON». Згодом ми покажемо, що фізика підпорогової провідності передбачає значення $SS \geq 60 mB/\text{декада}$. У транзистора доброї якості допороговий розкид практично однаковий для передавальних характеристик як низької, так і високої напруги V_{DS} (рис. 10). Часто спостерігають збільшення SS зі збільшенням V_{DS} , що пов'язують з виявами 2D електростатики MOS, до детального розгляду якої ми перейдемо пізніше.

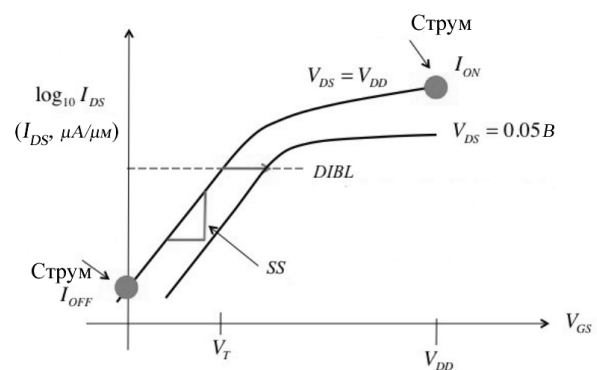


Рис. 11. Передавальні характеристики n -MOSFET, ввімкненого за схемою зі спільним витоком, з демонстрацією двох метрик SS та $DIBL$. Струм стоку I_{DS} на цьому рисунку відкладено в логарифмічній шкалі.

Підпорогові характеристики зсуваються ліворуч мірою збільшення стокової напруги V_{DS} . Цей зсув пов'язують з ефектом зниження бар'єру, індукованим стоком, для якого в англійській літературі застосовують абревіатуру $DIBL$. Цей ефект можна визначити як горизонтальний зсув низько- та високовольтних підпорогових характеристик, поділений на різницю стокових напруг. $DIBL$ тісно пов'язаний з двома пороговими напругами, зображеними на рис. 11. В ідеального транзистора $DIBL$ нульовий і порогова напруга не залежить від V_{DS} : $V_T(\text{lin}) = V_T(\text{sat}) = V_T$.

Для поняття порогової напруги в літературі застосовують декілька визначень. Часом під нею розуміють таку напругу на затворі, за якої дифузійний струм у каналі дорівнює дрейфовому. Однак ми у нашому подальшо-

му розгляді вважатимемо її такою напругою на затворі, за якої вже помітний стоковий струм. Існують різні підходи до точнішого визначення цього поняття. Наприклад, можна визначити цю напругу так, як зображено на графіку $I_{DS} \propto V_{GS}$ (рис. 10). А можна вчинити по-іншому, як на рис. 11: вибрати невеликий стоковий струм, наприклад, 10^{-7} А/μм, позначений на цьому рисунку пунктирною лінією, і визначити як напругу на затворі V_{GS} , за якої спостерігатиметься такий струм. Тому, наводячи порогову напругу, необхідно вказати, на який саме спосіб її було визначено.

Нарешті, звернімо увагу на ще одну обставину. На рисунках 1 та 4 струм, який входить у стік транзистора *n*-MOSFET, позначено як I_S .

В ідеальному випадку такий самий струм витікає з каналу провідності: $I_D = -I_S \equiv I_{DS}$. На практиці має місце певний струм витікання¹ (в підкладку), так що $I_D > I_S$. В подальшому викладі струм витікання ми не враховуватимемо і вважатимемо, що $I_D = |I_S| \equiv I_{DS}$.

7. Керування транзистором

Більшістю типів транзисторів керують шляхом контролювання висоти енергетичного бар'єру в результаті зміни напруги на затворі. До таких транзисторів належать польові транзистори MOSFET, HEMT, JFET (польовий транзистор з керуючим *p-n*-переходом), а також біполярні транзистори HBT (біполярний гетеротранзистор) та BJT (біполярний транзистор *n-p-n* або *p-n-p*) [11, 30, 31]. Принципи керування транзисторами легко зрозуміти, звернувшись до їхньої зонної структури.

Транзистор MOSFET є суттєво двовимірною структурою. Проте, більшу частину важливих особливостей роботи MOSFET можна зрозуміти з використанням лише одновимірних зонних діаграм вздовж осі *x*, напрям якої збігається з напрямом руху електрона вздовж каналу провідності від витіку до стоку (рис. 12).

Рис. 12. Переріз *n*-MOSFET і система координат, використовувана для графічного зображення енергії в залежності від координати точки при рухові від витіку вздовж каналу провідності до стоку. Вісь *z* направлено за рисунок вздовж ширини каналу провідності *W*.

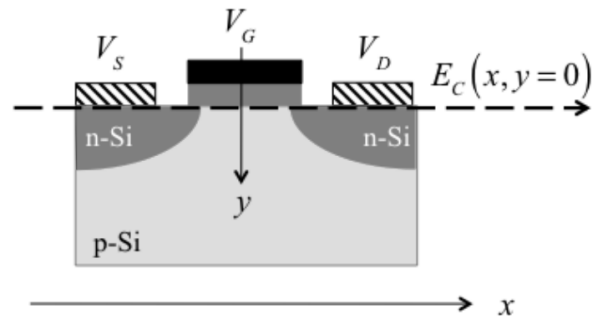


Рис. 12. Переріз *n*-MOSFET і система координат, використовувана для графічного зображення енергії в залежності від координати точки при рухові від витіку вздовж каналу провідності до стоку. Вісь *z* направлено за рисунок вздовж ширини каналу провідності *W*.

Контактні області витіку та стоку *n*-MOSFET сильно леговані донорами, а канал провідності за нульової напруги на затворі має діркову провідність. В однорідно легованому масивному напівпровіднику енергія зон не залежить від координати, при цьому рівень Фермі розташований поблизу дна зони провідності для напівпровідника *n*-типу та поблизу стелі валентної зони для напівпровідника *p*-типу.

У верхній частині рис. 13 показані просторово розділені області витіку та стоку *n*-типу і каналу провідності *p*-типу. У розділеному стані у витіку та стоку $E_F \approx E_C$, а в каналі провідності $E_F \approx E_V$. Проте коли всі три області сполучені, електрохімічний потенціал у стані рівноваги повинен скрізь бути однаковий ($E_F = \text{Const}$).

¹ В україномовній літературі для цього струму (leakage current) часто вживають термін «струм витіку». Проте в контексті фізики нанотранзисторів це призводить до плутанини зі струмом через термінал витіку, і тому ми в цих статтях використовуватимемо термін «струм витікання».

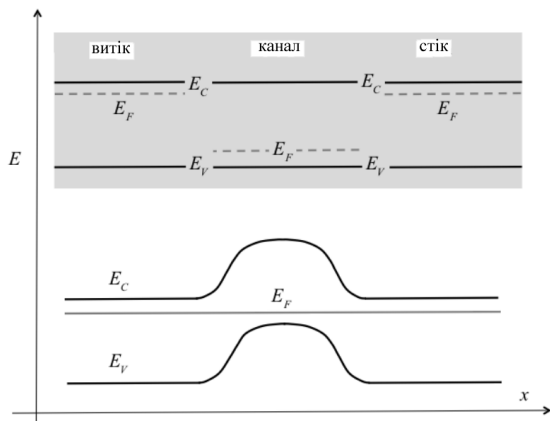


Рис. 13. Одновимірні зонні діаграми n -MOSFET у стані рівноваги. Згори зображено рівні енергії відокремлених витоку та стоку n -типу (— енергія дна зони провідності) й каналу провідності p -типу (— енергія стелі валентної зони). Внизу зображено хід енергії в стані рівноваги.

Вирівнювання рівня хімпотенціалу вздовж транзистора призводить до того, що зарядова рівновага порушується, і виникає електростатичний потенціальний бар'єр між областями витоку та стоку з одного боку, і каналом з другого. Перші дві області набувають позитивного потенціалу поля p - n -переходу, який знижує рівні енергії:

$$\begin{aligned} E_C(x) &= E_C - q\psi(x), \\ E_V(x) &= E_V - q\psi(x), \end{aligned} \quad (5)$$

де індекс «0» позначає величину відповідної енергії за відсутності електростатичного потенціалу.

Оскільки транзистор перебуває в рівновазі, то струм у каналі провідності не тече. Натомість виник потенціальний бар'єр, який відокремлює електрони у витоку від електронів у стоку. Цей енергетичний бар'єр відіграє вирішальну роль у роботі польового транзистора.

Рис. 14 показує, що відбувається з профілем зони провідності транзистора n -MOSFET при прикладенні позитивної напруги на затвор. Оскільки $V_S = V_D = 0$, то рівень хімпотенціалу у всіх трьох областях практично однаковий, транзистор перебуває в рівновазі, струм у каналі провідності не протікає.

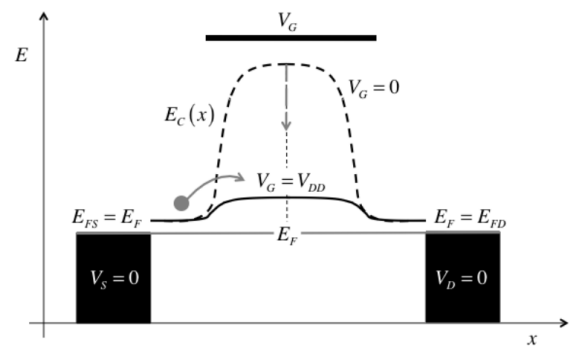


Рис. 14. Зонна структура n -MOSFET в рівноважному стані при нульовій напрузі на затворі (пунктирна крива) і при великій позитивній напрузі на затворі (суцільна крива). Прикладання напруги до затвору не порушує рівноваги, оскільки термінал затвору ізолюваний від каналу провідності.

Термінал затвору ізолюваний від каналу провідності в кремнієвій підкладці шаром діелектрику SiO_2 , але позитивний потенціал, поданий на затвор, впливає на зонну структуру напівпровідника. Він підвищує електростатичний потенціал у каналі, що, згідно з (5), знижує енергію дна зони провідності.

Важливо, що прикладення напруги до затвору не зміщує рівня Фермі в каналі провідності. Прикладення позитивної напруги до затвору знижує рівень Фермі у металічному терміналі затвору, однак, цей термінал ізолюваний від підкладки. Рівень Фермі каналу провідності в підкладці можна змінити, тільки прикладаючи напругу до витоку та/або стоку, оскільки їхні рівні Фермі пов'язані з рівнем Фермі каналу провідності.

Отже, прикладання напруги до затвору тільки знижує або підвищує потенційний бар'єр поміж витоком та стоком. Але транзистор залишається в рівновазі, струм у каналі відсутній. Той факт, що рівновага в транзисторі не порушується при прикладенні потенціалу до затвору, як ми покажемо пізніше, суттєво полегшує аналіз електростатики MOS.

Коли до стоку прикладено позитивну напругу, енергії змінюються так, як це зображено на рис. 15. Виток заземлено, тож його рі-

вень Фермі не змінюється порівняно зі станом рівноваги, а позитивна напруга, прикладена до стоку, понижує рівень Фермі на стоці на величину qV_{DS} .

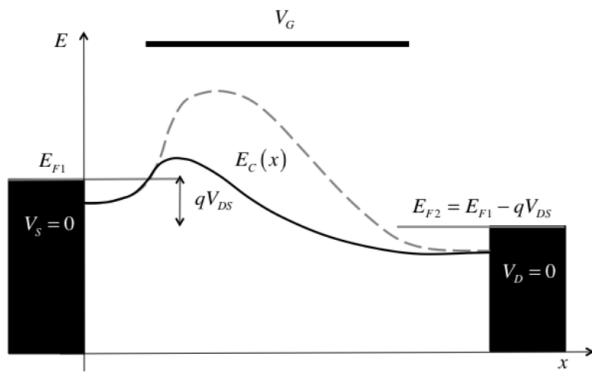


Рис. 15. Зміна енергії дна зони провідності $E_C(x)$ вздовж каналу провідності n -MOSFET, коли прикладено напругу до стоку і до затвору: пунктирна лінія відповідає великому значенню V_G і малому V_{DS} , а суцільна – великим V_G і V_{DS} .

Розгляньмо спершу той випадок, коли до затвору прикладено невелику напругу, а до стоку – велику. Цей випадок зображено пунктирною лінією на рис. 15. У транзисторі доброї якості висота енергетичного бар'єру між витоком і каналом провідності контролюється майже виключно напругою, прикладеною до затвору. Якщо напруга на затворі мала, то бар'єр достатньо високий, і тільки лічені електрони мають енергію, достатню для того, щоб подолати цей бар'єр і досягнути стоку. Транзистор перебуває в стані «OFF», а струм $I_{DS} \approx 0$: його визначає переважно незначний струм витікання I_{OFF} (рис. 11).

Коли і до стоку, і до затвору прикладено велику напругу, то напруга на затворі підвищує електростатичний потенціал у каналі провідності й знижує висоту бар'єру. Якщо бар'єр робиться достатньо низьким, то вже значна частина електронів з витоку може «перестрибнути» через нього й рухатися до стоку. Транзистор перебуває в стані «ON» з максимальним струмом I_{ON} при $V_{GS} = V_{DS} = V_{DD}$ (рис. 9).

Основний принцип роботи більшості типів транзисторів – керування струмом шляхом зміни висоти бар'єру внаслідок прикладення напруги на затвор. Цим фактично вичерпується фізика станів транзистора I_{OFF} та I_{ON} (рис. 9). Однак, для розуміння всієї вольт-амперної характеристики транзистора слід звернутися до діаграм зонної структури.

На рис. 16 зображено результати моделювання зміни $E_C(x)$ при збільшенні напруги на затворі в лінійній області ВАХ. Впадає в око те, що при високих значеннях напруги на затворі величина $E_C(x)$ змінюється практично лінійно вздовж каналу провідності, що відповідає практично сталому електричному полю, як і слід очікувати для лінійної області ВАХ, яка відповідає резистору, контрольованому напругою на затворі (рис. 7).

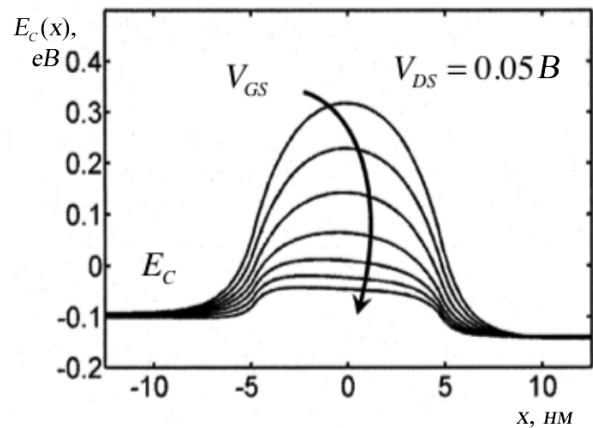


Рис. 16. Моделювання функції $E_C(x)$ для нанотранзисторів. Прикладено невелику напругу до стоку: транзистор працює в лінійному режимі. Кожен з графіків відповідає певному значенню V_{GS} , величина якої збільшується згори вниз [32].

Рис. 17 демонструє результати моделювання функції $E_C(x)$ для нанотранзисторів в області насичення. Мірою того, як дедалі більша напруга на затворі знижує бар'єр, дедалі більше електронів з витоку долають бар'єр і далі рухаються до стоку. Цей рисунок також пояснює, чому струм стоку насичується і далі майже не росте зі збільшенням напруги на стоку. Причиною цього є бар'єр між витоком і каналом, який і обмежує струм до стоку.

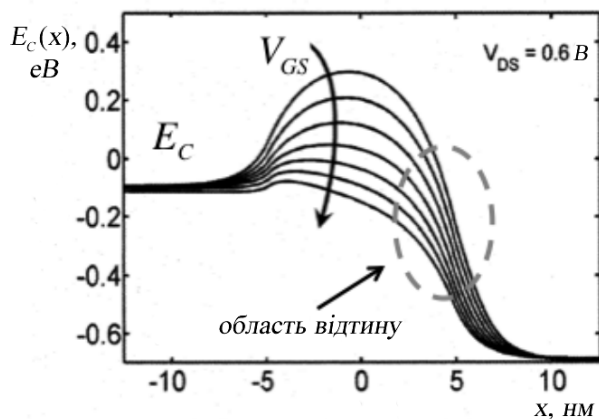


Рис. 17. Моделювання функції $E_C(x)$ для нанотранзисторів. Прикладено велику напругу до стоку: транзистор працює в області насичення. Кожний з графіків відповідає певному значенню V_{GS} , величина якої збільшується згори вниз [32]. Область відтину ми обговоримо пізніше.

Цей бар'єр добре видно на рис. 17 при найбільшому із наведених значень V_{GS} , а також на більш докладних рисунках 18: на кривих (б) та (г) для $V_{DS} = V_{GS} = 0.6$. При моделюванні було використано напівкласичний опис транспорту електронів у нанотранзисторах з каналом провідності довжиною не менш як 10 нм [32 – 34].

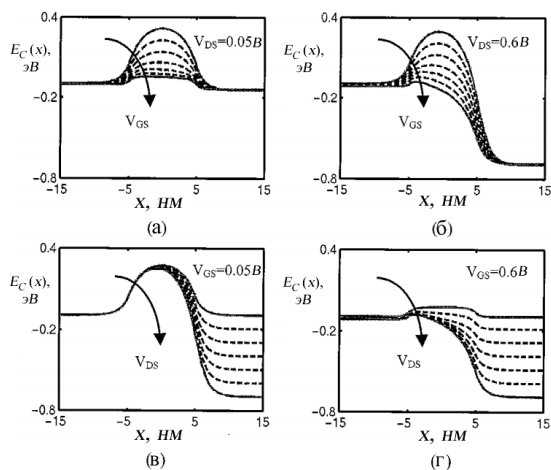


Рис. 18. Моделювання функції $E_C(x)$ для нанотранзисторів:

- (а) $V_{DS} = 0.05B$, $V_{GS} \propto 0.0 \Leftrightarrow 0.6B$ (рис. 16);
- (б) $V_{DS} = 0.6B$, $V_{GS} \propto 0.0 \Leftrightarrow 0.6B$ (рис. 17);
- (в) $V_{GS} = 0.05B$, $V_{DS} \propto 0.0 \Leftrightarrow 0.6B$;
- (г) $V_{GS} = 0.6B$, $V_{DS} \propto 0.0 \Leftrightarrow 0.6B$ [32].

При збільшенні напруги на затворі бар'єр між витоком і каналом провідності не зникає (рис. 18г), що перешкоджає струмові зростати. Навіть за дуже значної напруги на затворі цей невеликий бар'єр однак лишається. Слід підкреслити: без цього бар'єру й керування ним з боку затвору не було б і транзистора.

8. Вольт-амперна характеристика MOSFET з позицій моделі термоелектронної емісії

Описати вольт-амперну характеристику польового транзистора в балістичному режимі струму, коли електрон проходить канал провідності, не розсіюючись, математично можна, використовуючи просту модель термоелектронної емісії. Розгляньмо ВАХ n -MOSFET, ввімкненого за схемою зі спільним витоком (рис. 9). Сумарний струм стоку є різницею двох струмів – від витоку до стоку (зліва – направо) і від стоку до витоку (справа – наліво) з доланням бар'єру в обох напрямках:

$$I_{DS} = I_{LR} - I_{RL}. \quad (6)$$

Модель термоелектронної емісії передбачає те, що струм I_{LR} створюється термічними електронами, здатними подолати потенційний бар'єр. Відтак цей струм пропорційний імовірності долання бар'єру E_{SB} на шляху електрона від витоку до стоку:

$$I_{LR} \propto e^{-E_{SB}/kT}; \quad (7)$$

і аналогічно для струму I_{RL} :

$$I_{RL} \propto e^{-E_{DB}/kT}, \quad (8)$$

де E_{DB} – бар'єр на шляху електрона від стоку до витоку. Оскільки прикладення напруги на стік знижує на стоку, то $E_{DB} > E_{SB}$. При нульовому $DIBL$

$$E_{DB} = E_{SB} + qV_{DS},$$

тож

$$I_{RL} / I_{LR} = e^{-qV_{DS}/kT}$$

Як підсумок одержуємо

$$I_{DS} = I_{LR} \left(1 - e^{-qV_{DS}/kT}\right). \quad (9)$$

На вершині бар'єру зустрічаються два потоки електронів – один потік рухається праворуч, а другий – ліворуч; але важливо, що вони рухаються з тією ж самою кінетичною енергією, а, отже, і з однаковими швидкостями. Струм є добутком перенесеного заряду на швидкість. У випадку MOSFET електрони рухаються в 2D-каналі провідності, тому потрібно врахувати поверхневий заряд (K/cm^2). Струм дорівнює

$$I_{LR} = W \underline{Q}^+ \Big|_{x=0} v_T,$$

де $\underline{Q}^+ \Big|_{x=0}$ – поверхневий заряд на вершині бар'єру, створений електронами, які рухаються з додатними швидкостями. Аналогічно

$$I_{RL} = W \underline{Q}^- \Big|_{x=0} v_T,$$

тому сумарний заряд від обох потоків дорівнює

$$\underline{Q} \Big|_{x=0} = \frac{I_{LR} + I_{RL}}{W v_T} = \frac{I_{LR}}{W v_T} \left(1 + e^{-qV_{DS}/kT}\right). \quad (10)$$

Звідси знаходимо струм I_{LR} , підставляємо його в (9) і остаточно одержуємо ВАХ $I_{DS} \propto V_{DS}$ для балістичного MOSFET:

$$I_{DS} = W \underline{Q} \Big|_{x=0} v_T \frac{(1 - e^{-qV_{DS}/kT})}{(1 + e^{-qV_{DS}/kT})}. \quad (11)$$

Пізніше ми виведемо рівняння (11) більш строго, обговоримо його обмеження і визначимо швидкість. Разом із тим, загальна поведінка балістичної ВАХ цілком зрозуміла вже з позицій простої моделі термоелектронної емісії для транзистора з контрольованим бар'єром.

Проаналізуємо вираз (11) для низьких і високих значень напруги на стоку V_{DS} . Для низьких значень V_{DS} розклад у ряд Тейлора експонент дає

$$I_{DS} = W \underline{Q} \Big|_{x=0} v_T \frac{V_{DS}}{2kT/q} = G_{CH} V_{DS} = \frac{V_{DS}}{R_{CH}}, \quad (12)$$

де G_{CH} та R_{CH} – провідність та опір каналу транзистора. Вираз (12) є балістичним аналогом лінійної області на рис. 9.

Тепер розглянемо вираз (11) для випадку високих значень V_{DS} , в області насичення (рис. 9). У цьому випадку $I_{RL} \ll I_{LR}$ і струм стоку зазнає насичення при $I_{DS} = I_{LR}$. У цьому граничному випадку $V_{DS} \gg kT/q$ і (11) спрощується до

$$I_{DS} = W \underline{Q} \Big|_{x=0} v_T, \quad (13)$$

тобто при високих значеннях V_{DS} струм не залежить від напруги на стоку. Однак, як ми побачимо далі, ефект *DIBL* спричиняє зростання заряду $\underline{Q} \Big|_{x=0}$ зі збільшенням напруги на стоку, тож струм при високих значеннях V_{DS} продовжує зростати зі збільшенням напруги, хоча й значно повільніше, аніж у лінійній області.

Тепер звернімося до передавальних характеристик на рис. 11. Вони являють собою залежності $I_{DS} \propto V_{GS}$ при фіксованих значеннях V_{DS} . Зафіксуємо цю напругу на стоку настільки високою, що струм визначається виразом (13). Поставмо питання: як змінюється заряд $\underline{Q} \Big|_{x=0}$ зі зміною напруги на стоку?

Для високих значень V_{DS} струм $I_{RL} =$, тому з (10) випливає, що

$$\underline{Q} \Big|_{x=0} = \frac{I_{LR}}{W v_T}. \quad (14)$$

Струм I_{LR} спричинено термоелектронною емісією витоку в напрямку до каналного бар'єру. Прикладення напруги до затвору знижує цей бар'єр:

$$I_{LR} \propto e^{-E_{SB}/kT} = e^{-(E_{SB} - qV_{GS}/m)/kT}, \quad (15)$$

де E_{SB} – висота бар'єру при вході на нього з боку витоку при нульовому потенціалі на затворі ($V_{GS} =$), а $1/m$ – частка потенціалу на затворі, що пробиває діелектричну прокладку

затвора. З (15) та (14) випливає, що

$$Q(V_{GS}) = \underline{Q}|_{V_{GS}=0} e^{qV_{GS}/mkT}. \quad (16)$$

Тепер з (16) та (13) випливає, що струм зростає експоненційно зі збільшенням напруги на затворі:

$$I_{DS} = W | \underline{Q}|_{V_{GS}=0} | v_T e^{qV_{GS}/mkT}. \quad (17)$$

Нескладно показати, що для збільшення струму в 10 разів (декада) напругу на затворі потрібно збільшити на $2.3mkT/q \geq 0.060V$ (при кімнатній температурі, $kT = 0,026 eV$, $m = 1$). Такий допороговий розкид $SS \geq 60 mV/декада$ характерний для термоелектронної емісії через бар'єр.

Отже, відповідно до (17), струм стоку не залежить від напруги на стоку, однак, у реальних пристроях усе ж спостерігають невелике зростання струму стоку зі збільшенням V_{DS} , оскільки напруга на стоку мов би «допомагає» затвору зменшити різницю потенціалів між витоком і каналним бар'єром, як це зображено на рис. 19.

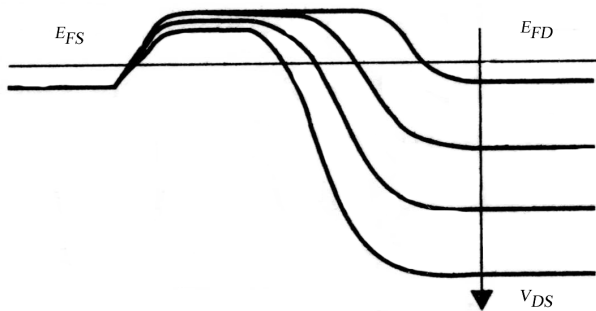


Рис. 19. Схематичне зображення ефекту DIBL.

Для опису ефекту *DIBL* ми потребуватимемо врахування 2D-електростатики, до чого ми повернемося пізніше.

Вираз (17) показує експоненційне зростання $I_{DS} \propto V_{GS}$, що його ми бачимо на рис. 11 нижче від порогу. Однак, вище від порогу струм зростає зі збільшенням напруги на затворі вже не експоненційно, а приблизно лінійно. Пізніше, аналізуючи електростатику MOSFET, ми покажемо, що заряд (16) вище від порогу збільшується лінійно з V_{GS} згідно з виразами

$$Q(V_{GS}, V_{DS}) = -C_{ox}(V_{GS} - V_T), \quad V_T = V_{T0} - \delta V_{DS}, \quad C_{ox} = \kappa_{ox} \epsilon_0 / t_{ox}, \quad (18)$$

де C_{ox} – поверхнева ємність діелектричної прокладки, обернено пропорційна до її товщини t_{ox} , κ_{ox} – діелектрична проникність матеріалу прокладки, ϵ_0 – діелектрична проникність вакууму.

Отже, вихідну характеристику транзистора MOSFET в балістичному режимі в цілому достатньо просто пояснити з позицій простої моделі термоелектронної емісії с урахуванням контрольованого затвором бар'єру.

Вся фізика транзистора зводиться фактично до електростатики й транспорту електронів. А роль інженерного дизайну транзисторів, як ми покажемо далі, критично зростає з мірою їх мініатюризації.

Рис. 20 ілюструє ключові принципи вдалого дизайну нанотранзисторів. Вершина бар'єру є критичною точкою, якій відповідає початок фізичного каналу провідності, – далі ми називатимемо її віртуальним витоком. У якісному транзисторі висота бар'єру строго контролюється напругою на затворі і тільки дуже слабо залежить від напруги на стоку.

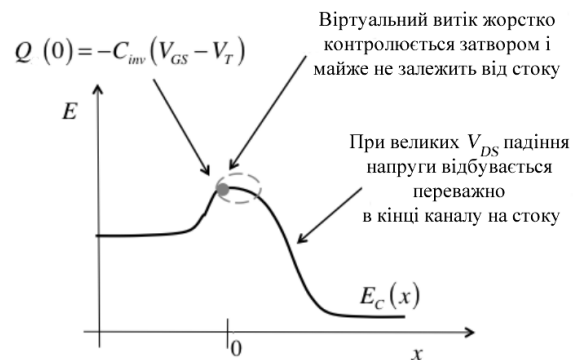


Рис. 20. Хід бар'єру якісно зібраного нанотранзистора при великих напругах на затворі й на стоку. В такому нанотранзисторі заряд на вершині бар'єру дуже близький до значення, що має місце в транзисторі з довгим каналом провідності, коли зовнішнім електричним полем можна знехтувати. У якісному нанотранзисторі зовнішнє поле низьке на початку каналу провідності, і при високих V_{DS} напруга на стоку тільки несуттєво впливає на область у районі вершини бар'єру.

При низьких V_{DS} та високих V_{GS} потенціал у каналі спадає приблизно лінійно, тож електричне поле приблизно стає. При високих напругах і на стоку і на затворі електричне поле сильне й змінюється вздовж каналу нелінійно. При початку каналу (біля вершини бар'єру) електричне поле слабе, але біля стоку поле дуже сильне. В області насичення збільшення напруги на стоку збільшує падіння потенціалу на ділянці каналу з сильним полем, проте майже не впливає на область поблизу вершини бар'єру (при невеликому значенні *DIBL*). Оскільки саме область поблизу вершини бар'єру контролює струм I_{DS} , то він в області насичення менш чутливий до напруги на стоку.

Електрони, що в балістичному нанотранзисторі подолали бар'єр (рис. 20), рухаючись у бік стоку, набувають значну кінетичну енергію. У достатньо «масивних» транзисторах, які працюють у дифузійному режимі, ця енергія передається кристалічній ґратці шляхом електрон-фононного розсіяння. Однак, у балістичних нанотранзисторах електрони пролітають до стоку, не зазнаючи розсіювання, і як наслідок, їхня швидкість у кінцевій частині каналу дуже велика. Оскільки струм є добутком заряду на швидкість, то в області насичення густина електронів при їхній високій швидкості буде дуже низькою. У класичній теорії MOSFET та частина каналу, в якій падіння потенціалу велике, а густина електронів мала, має назву області відтину каналу. В транзисторах з коротким каналом область відтину може займати значну частину каналу, однак, у добрих з погляду електростатичного дизайну нанорозмірних MOSFET завжди повинна бути невелика область поблизу витоку, що перебуває під контролем затвору й характеризується невеликим падінням потенціалу.

Транзистор із довгим каналом провідності при високих значеннях напруги як на затворі, так і на стоку зображено на рис. 21. Порівнюючи його з короткоканальним транзистором на рис. 20, бачимо, що тут під контролем затвору перебуває більша частина каналу, але невелика область відтину поблизу стоку од-

нак наявна. Саме ця область відтину при високій напрузі на стоку спричиняє насичення струму. В області насичення струм переважно зумовлений транспортом електронів у низькопольовій частині каналу поблизу витоку, а найбільше падіння потенціалу вздовж каналу припадає на область з високим електричним полем поблизу стоку. Щойно електрони входять в область відтину, як вони дуже швидко потрапляють на стік.

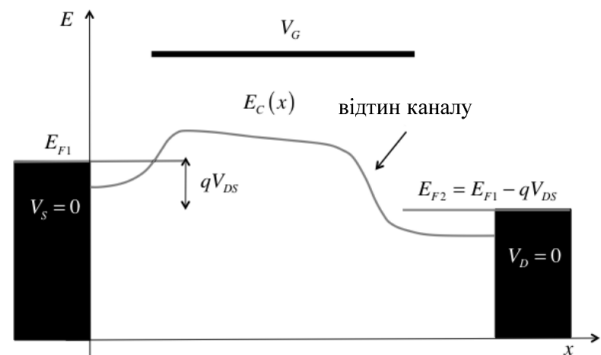


Рис. 21. Схематичний хід $E_C(x)$ для транзистора з довгим каналом провідності при високих значеннях напруги як на затворі, так і на стоку. У цьому випадку низьке зовнішнє електричне поле «покриває» значну частину каналу провідності й область відтину каналу невелика. Додаткове збільшення напруги на стоку дещо збільшує область відтину, довжина якої, однак, охоплюватиме лише невелику частину довгого каналу провідності.

Отже, у якісному нанотранзисторі область поблизу вершини бар'єру перебуває під жорстким контролем затвору. Це – найважливіша мета дизайну нанотранзисторів, і вона робиться дедалі актуальнішою, коли відбувається дальше зближення стоку й витоку. У балістичному нанотранзисторі всі електрони, які подолали бар'єр віртуального витоку, потрапляють без розсіяння на стік. Дизайн електростатики MOSFET народжує нові проблеми зі зменшенням довжини каналу провідності, проте фізичні принципи дизайну лишаються ті ж самі. Разом із тим, фізична природа транспорту електронів суттєво змінюється мірою того, як транзистори дедалі мініатюризуються. Фізично коректний опис електронного

транспорту в нанотранзисторах стає суттєвим елементом інженерного дизайну MOSFET.

Звернімо також увагу на те, що зонні діаграми MOSFET схожі на аналогічні діаграми для біполярних транзисторів на двох $p-n$ -переходах BJT, сконструйованих у 1951 році Вільямом Шоклі з колегами, які до початку 1970-х були основними пристроями твердотільної електроніки [11, 30]. В обох випадках струм контролюється висотою бар'єру [35]. Вітик MOSFET аналогічний до емітера BJT, канал MOSFET – до бази, а стік – до колектора.

10. Висновки

У першій із нової серії навчально-методичних статей, розрахованих на науковців, викладачів вищої школи та студентів, ми дали загальний опис польового транзистора метал-діелектрик-напівпровідник MOSFET, що є базовим пристроєм сучасної електроніки. Ми розглянули фізичну структуру MOSFET та його вольт-амперні характеристики двох типів – вихідні й передавальні, описали 10 метричних показників MOSFET, достатніх для аналізу якості нанотранзисторів, обговорили принципи керування польовими транзисторами через прикладання напруги на затвор. Показано, що завжди існує бар'єр на межі між стоком і каналом провідності, який отримав назву віртуального стоку. Як ми покажемо в наступних статтях, факт існування віртуального стоку привів у кінцевому підсумку до розробки найбільш адекватного методу аналізу роботи нанотранзистрів, відомого як метод віртуального витоку/проходження. Цей метод бере початок у піонерських роботах Р. Ландауера, і був пізніше розвинутий С. Датта і М. Лундстромом. Стаття завершується викладом математичної моделі вольт-амперної характеристики MOSFET в рамках простих уявлень про термоелектронну емісію як причину інжекції електронів у канал провідності. У наступних статтях буде показано, що цю модель можна використати як основу для аналізу роботи нанотранзистора і побудови досконаліших моделей.

Надалі ми розглянемо роботу MOSFET у традиційному викладі і в моделі віртуального витоку, проаналізуємо при цьому рівняння Пуассона – Больцмана та наближення виснаження, сформулюємо критерії для слабкої, помірної та сильної інверсії, покажемо, як зв'язані між собою поверхневий потенціал і напруга на затворі, опишемо рухомий електронний заряд нижче та вище від порогової напруги, його роль у структурах з дуже тонкою підкладкою, розглянемо ефекти 2D електростатики і сформулюємо модель віртуального витоку з позицій підходу «згори – вниз». Насамкінець буде побудовано адекватну фізичну картину транспортних явищ у нанотранзисторах у рамках концепції «знизу – вгору» Ландауера – Датта – Лундстрома, і показано її зв'язок з традиційним підходом «згори – вниз».

Окремо в наступних статтях ми зупинимося на короткоканальних ефектах, з яких поки ми достатньо докладно розглянули лише ефект зниження бар'єру, індукованого стоком *DIBL*. Поряд із ним існують також інші ефекти короткого каналу, зокрема, ефект збільшення довжини просторового заряду стоку і витоку в об'ємі порівняно з межею поділу підзатворний діелектрик/канальний напівпровідник. Цей ефект виявляється вже за субмікронних довжин каналів (70–40 нм) [36]. До розгляду цього та інших короткоканальних ефектів ми повернемося пізніше.

На завершення наголосимо: стаття є наслідком прослуховування одним з нас (ЮОК) курсу лекцій «Fundamentals of Nanotransistors» [28], прочитаних он-лайн в 2016 році проф. Марком Лундстромом (Mark Lundstrom), в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u]. В ній також використано напрацювання авторського курсу «Фізика конденсованого середовища», який інший автор (МВС) упродовж останніх років читає для магістрів факультету радіофізики, електроніки і комп'ютерних систем Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Список використаної літератури

- [1]. V. I. Ilchenko, O. T. Prokaza, M. V. Strikha. *Fizychni teorii: liudy, idei, podii. Navchalnyi posibnyk* (Luhansk: Elton-2: 2012).
- [2]. M. V. Strikha, *Ukr. fizychn. zh.*, **59**, No 8, 830 – 839 (2014).
- [3]. Bo Lojek, *History of Semiconductor Engineering* (New York: Springer: 2007).
- [4]. G. E. Moore, *Electronics Magazine*, 4 – 7 (1965).
- [5]. M. Lundstrom, *Science*, **299**: 210 – 211 (2003).
- [6]. S. R. Hofstein, F. P. Heiman, *Proc. IEEE*, 1190 – 1202 (1963).
- [7]. C. T. Sah, *IEEE Trans. Electron Dev.*, **11**: 324 – 345 (1964).
- [8]. H. Shichman, D. A. Hodges, *IEEE J. Solid State Circuits*, **SC-3**: (1968).
- [9]. B. J. Sheu, D. L. Scharfetter, P. -K. Ko, M. -C. Jeng, *IEEE J. Solid State Circuits*, **SC-22**: 558 – 566 (1987).
- [10]. Y. Tsididis, C. McAndrew, *Operation and Modeling of the MOS Transistor* (New York: Oxford Univ. Press: 2011).
- [11]. Y. Taur, T. Ning, *Fundamentals of Modern VLSI Devices* (New York: Oxford Univ. Press: 2013).
- [12]. D. Frank, S. Laux, M. Fischetti, *Intern. Electron Dev. Mtg. (IEDM), Technical Digest*, 553 – 556 (1992).
- [13]. Z. Ren., R. Venugopal, S. Goasguen, S. Datta, M. S. Lundstrom, *IEEE Trans. Electron Dev.*, **50**: 1914 – 1925 (2003).
- [14]. R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.*, **1**, № 3: 223 – 231 (1957).
- [15]. Yu. A. Kruglyak, N. Yu. Kruglyak, M. V. Strikha. *Sensorna elektronika i mikrosystemni tekhnolohii*. **3(9)**, No 4, 5 – 30 (2012).
- [16]. Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha. *Sensorna elektronika i mikrosystemni tekhnolohii*. **12**, No 3, 4 – 27 (2015).
- [17]. Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha. *Sensorna elektronika i mikrosystemni tekhnolohii*. **12**, No 4, 5 – 18 (2015).
- [18]. Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha. *Sensorna elektronika i mikrosystemni tekhnolohii*. **13**, No 1, 5 – 23 (2016).
- [19]. Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha. *Sensorna elektronika i mikrosystemni tekhnolohii*. **13**, No 2, 16 – 35 (2016).
- [20]. Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha. *Sensorna elektronika i mikrosystemni tekhnolohii*. **13**, No 3, 5 – 29 (2016).
- [21]. Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha. *Sensorna elektronika i mikrosystemni tekhnolohii*. **13**, No 4, 5 – 18 (2016).
- [22]. Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha. *Sensorna elektronika i mikrosystemni tekhnolohii*. **14**, No. 1. 5 – 20 (2017).
- [23]. Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha. *Sensorna elektronika i mikrosystemni tekhnolohii*. **14**, No 2, 27 – 45 (2017).
- [24]. Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha. *Sensorna elektronika i mikrosystemni tekhnolohii*. **14**, No 3, 5 – 23 (2017).
- [25]. S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport* (Singapore: World Scientific: 2012).
- [26]. Yu. A. Kruglyak, *Nanoehlektronika «snizu – vverh»* (Odessa: TES: 2015).
- [27]. S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport – Part B: Quantum Transport* (Singapore: World Scientific: 2018).
- [28]. M. Lundstrom, *Fundamentals of Nanotransistors* (Singapore: World Scientific: 2018); www.nanohub.org/courses/NT.
- [29]. Kwork K. Ng, *Complete Guide to Semiconductor Devices* (New York: Wiley Interscience: 2002).
- [30]. R. F. Pierret, *Semiconductor Device Fundamentals* (N. York: Addison-Wesley: 1996).
- [31]. I. M. Vikulin, V. I. Stafeev, *Fizika poluprovodnikovyyh priborov* (Moskva: Radio i svyaz': 1990).
- [32]. M. Lundstrom, Z. Ren, *IEEE Trans. Electron Dev.*, **49**: 133 – 141 (2002).
- [33]. Y. Naveh, K. K. Likharev, *IEEE Electron Device Lett.*, **21**, 242 – 244 (2000).
- [34]. Z. Ren, R. Venugopal, S. Datta, M. Lundstrom, D. Jovanovic, J. Fossum, *IEDM, Technical Digest*, 715 – 718 (2000).

[35]. E. O. Johnson, *RCA Rev.*, **34**: 80 – 94 (1973). *ductor Devices: Physics and Technology* (John Wiley and Sons: New York: 2012).

[36]. S. M. Sze, Ming-Kwei Lee. *Semicon-*

Стаття надійшла до редакції 17.08.2018 р.

PACS numbers: 72.80.Ey, 85.30.–z, 85.30.De, 85.30.Tv, 85.40.–e

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150488>

PHYSICS OF NANOTRANSISTORS: STRUCTURE, METRICS, AND CONTROL

*Yu. A. Kruglyak, M. V. Strikha**

Odesa State Environmental University,
Faculty of Computer Sciences
15 Lvivska Str, Odesa, Ukraine
(067) 725 2209, *E-mail: kruglyak.yual@gmail.com*

* Taras Shevchenko Kyiv National University
Faculty of Radiophysics, Electronics and Computer Sciences,
4g Hlushkov Av, Kyiv, Ukraine
V. E. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine,
41 Nauky Av, Kyiv, Ukraine, (044) 525 6033
E-mail: maksym_strikha@hotmail.com

Summary

The transistor is the key element of almost any electronic device. The fabrication of the working field-effect transistor in 1947 and integrated circuits in 1959 was the beginning of the revolutionary transformation of all electronics. In the course of the development of semiconductor technology, the number of transistors in integrated circuits doubled annually. This doubling of the number of transistors, accompanied by a continuous decrease in their size, continued at approximately the same rate for more than 50 years. The MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor) theory was formulated in the 1960s. The length of the conduction channel of the transistor at that time was hundreds of microns order. By the end of the 20th century, transistor sizes had reached a nanoscale, and the nanotransistor itself became the first of all nanoscale electronic devices to be the object of large-scale industrial production. Today, the length of the conduction channel of the transistor has approached 10 *nm*, which is several orders of magnitude lower than in the first MOSFET.

The task of this new series of our tutorial reviews directed to serve researchers, university teachers and students, is to discuss the physical models and principles underlying the functioning of nanoscale MOSFETs and based both on the traditional «top – down» approach and on a more modern approach originating in the works of Rolf Landauer who proposed the model of an elastic resistor long before its experimental confirmation in nanoconductors. Suprio Datta and Mark Lundstrom had rethought this model later and gave it the current sound and proved its applicability to electronic devices as nanoscopic, and micro- and macroscopic with arbitrary dimensions of 1D, 2D and 3D and operating in ballistic, quasi-ballistic and diffusion modes.

Keywords: nanoelectronics, field effect transistor, current-voltage characteristics, transistor metrics, transistor control, virtual source

ФІЗИКА НАНОТРАНЗИСТОРІВ: УСТРІЙ, МЕТРИКА ТА КЕРУВАННЯ

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

Одеський державний екологічний університет,
факультет комп'ютерних наук,
вул. Львівська, 15, Одеса, Україна

тел. (067) 725 2209, *E-mail: kruglyak.yual@gmail.com*

* Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
факультет радіофізики, електроніки і комп'ютерних систем,
пр. Глушкова, 4г, Київ, Україна, тел. (044) 526 0532;

Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України,
пр. Науки, 41, Київ, Україна, тел. (044) 525 6033,
E-mail: maksym_strikha@hotmail.com

Реферат

Транзистор є ключовим елементом практично будь-якого електронного приладу. Створення діючого польового транзистора в 1947 році та інтегральних схем у 1959 році стало початком революційного перетворення всієї електроніки. З розвитком напівпровідникової технології число транзисторів в інтегральних схемах щорічно подвоювалося, і це подвоєння, супроводжуване постійним зменшенням розміру транзисторів, тривало приблизно з однаковою швидкістю понад 50 років. Теорія польового транзистора метал-діелектрик напівпровідник з ізольованим затвором (MOSFET, Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor) була побудована в 60-х роках минулого століття. Тоді довжина каналу провідності транзистора становила сотні мікронів. До кінця 20 століття розміри транзисторів досягли наномасштабу, а сам нанотранзистор першим серед всіх нанорозмірних електронних пристроїв став об'єктом масового промислового виробництва. Сьогодні довжина каналу провідності транзистора наблизилася до 10 нм, що на декілька порядків менше, ніж у перших MOSFET.

У нашій новій серії методично-оглядових статей, орієнтованих на дослідників, студентів, аспірантів та викладачів вищої школи, ми обговоримо фізичні моделі і принципи, що лежать в основі функціонування нанорозмірних MOSFET. Ці моделі засновані як на звичному традиційному підході «згори – вниз», так і на більш сучасному підході, що бере свій початок ще в роботах Рольфа Ландауера, який запропонував модель пружного резистора задовго до її експериментального підтвердження в нанопровідниках. Супрійо Датта і Марк Лундстром переосмислили цю модель, надали їй нинішнє звучання і довели її застосовність для електронних макро-, мікро- та нанопристроїв довільної вимірності (1D, 2D і 3D), що працюють у балістичному, квазібалістичному і дифузійному режимах.

Ключові слова: наноелектроніка, польовий транзистор, вольт-амперні характеристики, метрика транзисторів, керування транзисторами, віртуальний витік

ОПТИЧНІ, ОПТОЕЛЕКТРОННІ І РАДІАЦІЙНІ СЕНСОРИ

OPTICAL AND OPTOELECTRONIC AND RADIATION SENSORS

PACS 42.55.-f; УДК 539.184

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150497>

A CHAOS-DYNAMICAL APPROACH TO ANALYSIS, PROCESSING AND FORECASTING MEASUREMENTS DATA OF THE CHAOTIC QUANTUM AND LASER SYSTEMS AND SENSORS

*A. V. Glushkov¹, V. V. Buyadzhi¹, V. B. Ternovsky², A. V. Ignatenko¹, A. A. Kuznetsova²,
A. Mashkantsev¹*

¹ Odessa State Environmental University, L'vovskaya str. 15, 65016, Odessa

² National University "Odessa Maritime Academy", Didrikhson str. 8, 65028, Odessa

E-mail: glushkovav@gmail.com

A CHAOS-DYNAMICAL APPROACH TO ANALYSIS, PROCESSING AND FORECASTING MEASUREMENTS DATA OF THE CHAOTIC QUANTUM AND LASER SYSTEMS AND SENSORS

*A. V. Glushkov¹, V. V. Buyadzhi¹, V. B. Ternovsky², A. V. Ignatenko¹, A. A. Kuznetsova²,
A. Mashkantsev¹*

Abstract. The paper is devoted to problem of development of new mathematical and computational tools for analysis and processing the measurements data of chaotic quantum and laser systems and quantum devices (sensors). The chaos-geometric approach proposed includes a combined group of non-linear analysis and chaos theory methods such as the autocorrelation function method, multi-fractal formalism, wavelet analysis, mutual information approach, correlation integral analysis, false nearest neighbour algorithm, Lyapunov's exponents and Kolmogorov entropy analysis, surrogate data method, memory functions, neural networks algorithms. There are presented the most effective schemes for computing the Lyapunov's exponents spectrum, Kaplan-Yorke dimension, Kolmogorov entropy etc.

Keywords: chaotic quantum systems and quantum sensors– analysis and processing the measurements data – chaos-geometric approach

ХАОС-ДИНАМІЧНИЙ ПІДХІД ДО АНАЛІЗУ, ОБРОБКИ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ ДАНИХ ВИМІРЮВАННЯ ДЛЯ ХАОТИЧНИХ КВАНТОВИХ СИСТЕМ І СЕНСОРІВ

*О. В. Глушков, В. В. Буяджи, В. Б. Терновський, Г. В. Ігнатенко, Г. О. Кузнєцова,
О. Машканцев*

Анотація. Стаття присвячена проблемі розробки нових математичних і обчислювальних засобів для аналізу і обробки даних вимірювань хаотичних квантових і лазерних систем і квантових пристроїв (сенсорів). Пропонується хаос-геометричний підхід, який включає об'єднану групу методів нелінійного аналізу та теорії хаосу, таких як метод автокореляційної функції, мультифрактальний формалізм, вейвлет-аналіз, метод взаємної інформації, метод кореляційного інтеграла, алгоритми помилкових найближчих сусідів і сурогатних даних, аналіз на основі показників Ляпунова і ентропії Колмогорова, формалізм функцій пам'яті, нейромережеві алгоритми і ін. Представлені найбільш ефективні схеми обчислення спектра показників Ляпунова, розмірності Каплана-Йорка, ентропії Колмогорова тощо.

Ключові слова: хаотичні квантові системи і квантові сенсори – аналіз і обробка даних вимірювань – хаос-геометричний підхід

ХАОС-ДИНАМИЧЕСКИЙ ПОДХОД К АНАЛИЗУ, ОБРАБОТКЕ И ПРОГНОЗИРОВАНИЮ ДАННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ ДЛЯ ХАОТИЧНЫХ КВАНТОВЫХ И ЛАЗЕРНЫХ СИСТЕМ И СЕНСОРОВ

А. Глушков, В. Буяджи, В. Терновский, А. Игнатенко, А. Кузнєцова, А. Машканцев

Аннотация. Статья посвящена проблеме разработки новых математических и вычислительных средств для анализа и обработки данных измерений хаотических квантовых и лазерных систем и квантовых устройств (сенсоров). Предлагаемый хаос-геометрический подход включает объединенную группу методов нелинейного анализа и теории хаоса, таких как метод автокорреляционной функции, мультифрактальный формализм, вейвлет-анализ, метод взаимной информации, метод корреляционного интеграла, алгоритмы ложных ближайших соседей и суррогатных данных, анализ на основе показателей Ляпунова и энтропии Колмогорова, формализм функций памяти, нейросетевые алгоритмы и др. Представлены наиболее эффективные схемы вычисления спектра показателей Ляпунова, размерности Каплана-Йорка, энтропии Колмогорова и т. д.

Ключевые слова: хаотические квантовые системы и квантовые сенсоры – анализ и обработка данных измерений – хаос-геометрический подход

1. Introduction

At present time a development of new mathematical and computational tools for analysis and processing the measurements data of chaotic quantum and laser systems and quantum devices (sensors) is traditionally of a great importance and actuality for further development of modern quantum technologies, including quantum optics and spectroscopy, quantum and nano-and sensor electronics and different physical, chemical, even biological applications (see Refs. [1–12]). The last decades have seen an impressive progress in the understanding, modelling and even prediction of the evolutionary dynamics of different nonlinear complex systems and analysis and processing the corresponding measurements data.

For a long time different statistical methods such as autoregression, moving average or combined autoregression moving average (ARMA) methods and their refined generalizations have been used in numerical processing measurements data for different systems, however, in fact majority of this methods are linear and deal with known principal and computational difficulties [1]. Their nonlinear analogs such parametric or nonparametric ARMA type models have the known advantages and disadvantages. Both the accuracy and the reliability of analysis on the basis of these statistical methods could be strongly affected by the fundamental knowledge of the complex temporal structure and nonlinear interaction in a system.

In the last years a new approaches to environmental measurements data analysis and processing are provided by using methods of the non-linear analysis, chaos, dynamical systems theories [1-12]. In the modern technical studies a role of the correct measurement data (spatial and time series of main parameters) is very high.

Below we are interested by the measurement data for of chaotic quantum and laser systems and quantum devices (sensors) and their analysis and processing and development of new mathematical and computational tools for their correct analysis.

In this paper we consider a problem of development of new mathematical and computational

tools for analysis and processing the measurements data of chaotic quantum and laser systems and quantum devices (sensors). The chaos-geometric approach proposed includes a combined group of non-linear analysis and chaos theory methods such as the autocorrelation function method, multi-fractal formalism, wavelet analysis, mutual information approach, correlation integral analysis, false nearest neighbour algorithm, Lyapunov's exponents and Kolmogorov entropy analysis, surrogate data method, memory functions, neural networks algorithms. There are presented the most effective schemes for computing the Lyapunov's exponents spectrum, Kaplan-Yorke dimension, Kolmogorov entropy etc. Their computational realization is based on the programs blocks of the "Geomath" and "Quantum Chaos" computational codes [13-23].

2. A Chaos-geometric approach to processing measurement data for complex systems

Our approach to analysis, processing and forecasting the measurement data of chaotic quantum and laser systems and quantum devices (sensors) is based on the fundamental results [1-6,13-15] and their generalizations. Formally, one could consider scalar chaotic quantum or laser system measurement parameter (say, an output amplitude) s and write it as:

$$s(n)=s(t_0 + n\Delta t) = s(n),$$

where t_0 is a start time, Δt is time step, and n is a number of measurements.

As the preliminary step of the data processing it is useful to check the known Gottwald-Melbourne chaotic test [8]. It supposes studying the parameter K , which is determined by a limiting behavior of a root-mean-square shift:

$$M(n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N [s(j+n) - s(j)]^2, \quad (1)$$

$$s(n) = \sum_{j=1}^n s(j) \cos(jc).$$

The cases of $K = 0$ and $K = 1$ correspond to a regular and chaotic dynamics respectively.

The first fundamental step of modelling is in reconstruction of the phase space using as well as possible information contained in $s(n)$. From the mathematical viewpoint, this procedure results in set of d -dimensional vectors $\mathbf{y}(n)$ replacing scalar measurements. One should further to operate with lagged variables $s(n+\tau)$, where τ is some integer to be defined, results in a coordinate system where a structure of orbits in phase space can be captured. Using a set of the time lags to create a vector in d dimensions,

$$\mathbf{y}(n)=[s(n), s(n + \tau), s(n + 2\tau), \dots, s(n + (d-1)\tau)], \quad (2)$$

the required coordinates are provided. The dimension d is defined as an embedding dimension, d_E .

In Refs. [1,8,9] a few approaches to the choice of proper time lag are presented. This point is important for the subsequent reconstruction of phase space. The first approach is to compute the linear autocorrelation function $C_L(\delta)$

$$C_L(\delta) = \frac{\frac{1}{N} \sum_{m=1}^N [s(m+\delta) - \bar{s}][s(m) - \bar{s}]}{\frac{1}{N} \sum_{m=1}^N [s(m) - \bar{s}]^2}, \quad (3)$$

$$\bar{s} = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N s(m)$$

and to look for that time lag where $C_L(\delta)$ first passes through zero. This gives a good hint of choice for τ at that $s(n + j\tau)$ and $s(n + (j + 1)\tau)$ are linearly independent. However, a linear independence of two variables does not mean that these variables are nonlinearly independent since a nonlinear relationship can differs from linear one. It is therefore preferably to utilize approach with a nonlinear concept of independence, e.g. the average mutual information. Briefly, the concept of mutual information can be described as follows.

Let there are two systems, A and B , with measurements a_i and b_k . The amount one learns in bits about a measurement of a_i from measurement of b_k is given by arguments of information theory [10]

$$I_{AB}(a_i, b_k) = \log_2 \left(\frac{P_{AB}(a_i, b_k)}{P_A(a_i)P_B(b_k)} \right), \quad (4)$$

where the probability of observing a out of the set of all A is $P_A(a_i)$, and the probability of finding b in a measurement B is $P_B(b_k)$, and the joint probability of the measurement of a and b is $P_{AB}(a_i, b_k)$. The mutual information I of two measurements a_i and b_k is symmetric and non-negative, and equals to zero if only the systems are independent.

The average mutual information between any value a_i from system A and b_k from B is the average over all possible measurements of $I_{AB}(a_i, b_k)$,

$$I_{AB}(\tau) = \sum_{a_i, b_k} P_{AB}(a_i, b_k) I_{AB}(a_i, b_k). \quad (5)$$

To place this definition to a context of observations from a certain physical system, let us think of the sets of measurements $s(n)$ as the A and of the measurements a time lag τ later, $s(n + \tau)$, as B set. The average mutual information between observations at n and $n + \tau$ is then

$$I_{AB}(\tau) = \sum_{a_i, b_k} P_{AB}(a_i, b_k) I_{AB}(a_i, b_k). \quad (6)$$

Now we have to decide what property of $I(\tau)$ we should select, in order to establish which among the various values of τ we should use in making the data vectors $\mathbf{y}(n)$. One could remind that the autocorrelation function and average mutual information can be considered as analogues of the linear redundancy and general redundancy, respectively, which was applied in the test for nonlinearity. The general redundancies detect all dependences in the time series, while the linear redundancies are sensitive only to linear structures. Further, a possible nonlinear nature of process resulting in the vibrations amplitude level variations can be concluded.

The fundamental goal of the d_E computing is in further reconstruction of the Euclidean space R^d large enough so that the set of points d_A can be unfolded without ambiguity. The embedding dimension, d_E , must be greater, or at least equal, than a dimension of the corresponding chaotic attractor, d_A , i.e. $d_E > d_A$.

The correlation integral analysis is one of the widely used techniques to study the signatures of chaos in a measurement data time series. If the measurement time series is characterized by an attractor, then the correlation dimension d is defined by a limit of relation of the $\log C(r)$ (C is a correlation integral) to \log of the corresponding radius [11]:

$$C(r) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2}{N(n-1)} \sum_{\substack{i,j \\ (1 \leq i < j \leq N)}} H(r - \| \mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j \|), \quad (7)$$

where H is the Heaviside step function with $H(u) = 1$ for $u > 0$ and $H(u) = 0$ for $u \leq 0$, r is the radius of sphere centered on \mathbf{y}_i or \mathbf{y}_j , and N is the number of data measurements. If the time series is characterized by an attractor, then the integral $C(r)$ is related to the radius r given by

$$d = \lim_{\substack{r \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} \frac{\log C(r)}{\log r}, \quad (8)$$

where d is correlation exponent that can be determined as the slop of line in the coordinates $\log C(r)$ versus $\log r$ by a least-squares fit of a straight line over a certain range of r , called the scaling region. In a chaotic case, the correlation exponent attains saturation with an increase in the embedding dimension. The saturation value of this exponent is defined as the correlation dimension (d_2) of the attractor.

Another approach to computing d_E is the false nearest neighbour algorithm. As a rule, the simultaneous application of two methods provides more exact determination d_E . The nearest integer above the saturation value provides the minimum or optimum embedding dimension for reconstructing the phase-space or the number of variables necessary to model the dynamics of the system. This concept can be applied, since the embedding dimension determined by both the correlation dimension and false nearest neighbour algorithms are identical.

The further important step is determination of predictability, which can be estimated by the Kolmogorov entropy. The Kolmogorov entropy is proportional to a sum of the positive Lyapunov's exponents.

The Lyapunov's exponents spectrum is one of the fundamental dynamical invariants for non-linear data system with a chaotic behaviour. Since the Lyapunov's exponents are defined as asymptotic average rates, they are independent of the initial conditions, and hence the choice of trajectory, and they do comprise an invariant measure of the attractor. An estimate of this measure is a sum of the positive Lyapunov's exponents.

The estimate of the attractor dimension is provided by the Kaplan-Yorke conjecture d_L

$$d_L = j + \frac{\sum_{\alpha=1}^j \lambda_\alpha}{|\lambda_{j+1}|}, \quad (9)$$

where j is such that $\sum_{\alpha=1}^j \lambda_\alpha > 0$ and $\sum_{\alpha=1}^{j+1} \lambda_\alpha < 0$, and

Lyapunov's exponents are taken in descending order.

The dimension d_L gives values close to the dimension estimates discussed earlier and is preferable when estimating high dimensions. To compute the Lyapunov's exponents spectrum, we use a method with higher order polynomials fitted map [1].

In Table 1 we present the main blocks of an universal approach to analysis and processing measurement data for studied systems [1-5,13-23].

Table 1.
Chaos-dynamical approach to analysis and processing environmental measurement data for chaotic quantum and laser systems and devices (sensors)

I. Preliminary study of data and assessment of the presence of chaos: <ol style="list-style-type: none"> 1. Test by Gottwald-Melbourne: $K \rightarrow 1 -$ chaos; 2. Fourier decompositions, irregular nature of change – chaos; 3. Spectral analysis, energy spectra statistics, the Wigner distribution, spectrum of power...
--



- II. The geometry of the phase space. Fractal Geometry:
4. Computing time delay τ (autocorrelation function or mutual information);
 5. Computing embedding dimension d_E by the method of correlation dimension or FNN algorithm;
 6. Computing multi-fractal spectra. Wavelet analysis;



- III. Prediction:
7. Computing global LEs: λ_α ; Kaplan-Yorke dimension d_L , KE, average predictability measure
 8. Determining the number of nearest neighbour points NN for the best prediction results;
 9. Methods of nonlinear prediction, neural networks and quantum neural networks algorithms, algorithm optimized trajectories, ...;

3. Prediction model and conclusions

The most complex topic of a chaos-geometric approach is realization of correct prediction of a measurement data chaotic dynamics for studied systems and devices. We propose to use a new method, which is based on using the traditional concept of a compact geometric attractor, in which evolves the measurement data, plus the implementation of neural networks (NNW) algorithm [1,13,14]. The meaning of the concept is in the doctrine of evolution attractor in the phase space of the system and in a sense the simulation (“guessing”) temporal evolution. It’s about the fact that the phase space of a system orbit some continuously rolled on itself as a result of dissipative forces and the nonlinear part of the dynamics, so it is possible to find in the neighborhood of any point of the orbit $\mathbf{y}(n)$ other points of the orbit $\mathbf{y}^r(n)$, $r = 1, 2, \dots, N_B$, arriving in the neighborhood of $\mathbf{y}(n)$ in different time moments which differ of n . Of course, then one can try to build different types of interpolation functions that take into account the whole neighborhood of the phase space, while explaining how the neighborhood evolve from $\mathbf{y}(n)$ around all points set near $\mathbf{y}(n+1)$. In terms of the theory of neural networks, the simulation

of the evolution of the system can be described by some generalized evolutionary neural dynamic equations. Simulating further the evolution of complex systems as appropriate neural network evolution with elements of self-learning, self-adaptability, etc., there is a significant opportunity to improve the quality of prediction of the evolutionary dynamics of modelling the attractor in a chaotic system. Modelling attractor by some record in memory, neural system evolutionary process, i.e. the transition from the initial state to the (next) final state, can be represented by a model of reconstruction of the full record on distorted information, that is a model of associative recognition. Domain of attraction of different attractors are separated by separatrices or by certain surfaces in the phase space, structure of which is quite complex. However, it imitates the properties of the chaotic object. The next step is to construct a parameterized nonlinear function $F(x, a)$, which transform $\mathbf{y}(n)$ to $\mathbf{y}(n+1) = F(\mathbf{y}(n), \mathbf{a})$, and use different, including the neural network criteria for determining the parameters \mathbf{a} . As the functional form of displaying, one may use, for example, polynomial basis functions. A measure of the quality of the curve fit to the data, which is determined from the condition, how exactly coincide $\mathbf{y}(k+1)$ with $F(\mathbf{y}(k), \mathbf{a})$ is a local deterministic error: $\varepsilon_D(k) = \mathbf{y}(k+1) - F(\mathbf{y}(k), \mathbf{a})$. If the mapping $F(\mathbf{y}, \mathbf{a})$ is local, then for each neighbor to $\mathbf{y}(k)$ point, $\mathbf{y}^{(r)}(k)$ ($r = 1, 2, \dots, N_B$) can

be written as $\mathbf{y}^{(r)}(k) = \mathbf{y}(r, k+1) - F(\mathbf{y}^{(r)}(k), \mathbf{a})$, where $\mathbf{y}(r, k+1)$ is the point in phase space, which evolves $\mathbf{y}(r, k)$. To measure the quality of the curve fit to the data, the local cost function

has the form (in fact, the function value for

the error): $W(\varepsilon, k) = \sum_{r=1}^{N_B} |\varepsilon_D^{(r)}(k)|^2 / \sum_{r=1}^{N_B} [\mathbf{y}(k) - \langle \mathbf{y}(r, k) \rangle]^2$ and the parameters, determined by minimizing $W(\varepsilon, k)$, are dependent on parameter \mathbf{a} . More formally, it is possible to start neural network algorithm, especially in terms of training an equivalent system of neural networks with the reconstruction and forecasting neural system state (correspondingly, correction of \mathbf{a}).

Therefore, we presented the possible complex of mathematical and computational tools for analysis and processing the measurements data of chaotic quantum and laser systems and quantum devices (sensors). The chaos-geometric approach proposed includes a combined group of non-linear analysis and chaos theory methods such as the autocorrelation function method, multi-fractal formalism, wavelet analysis, mutual information approach, correlation integral analysis, false nearest neighbour algorithm, Lyapunov's exponents and Kolmogorov entropy analysis, surrogate data method, memory functions, neural networks algorithms. It is self-understood that their concrete application will have some special peculiarities in dependence upon the measurement data quality of studied system or device.

References

- [1]. Glushkov, A. V. *Methods of a Chaos Theory*. OSENU: Odessa, **2012**.
- [2]. Glushkov, A. V.; Kuzakon, V. M.; Ternovsky, V. B.; Buyadzhi, V. V. Dynamics of laser systems with absorbing cell and backward-wave tubes with elements of a chaos. *Dynamical Systems Theory*; Awrejcewicz, J., Kazmierczak, M., Olejnik, P., Mrozowski, J., Eds.; Lodz Univ.: Lodz, **2013**; Vol. T2, pp 461-466.
- [3]. Prepelitsa, G. P.; Glushkov, A. V.; Lepikh, Ya. I.; Buyadzhi, V. V.; Ternovsky, V. B.; Zaichko, P. A. Chaotic dynamics of non-linear processes in atomic and molecular systems in electromagnetic field and semiconductor and fiber laser devices: new approaches, uniformity and charm of chaos. *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.* **2014**, 11(4), 43-57.
- [4]. Glushkov, A. V.; Ternovsky, V. B.; Buyadzhi, V. V.; Prepelitsa, G. P., Geometry of a Relativistic Quantum Chaos: New approach to dynamics of quantum systems in electromagnetic field and uniformity and charm of a chaos. *Proc. Intern. Geometry Center.* **2014**, 7(4), 60-71.
- [5]. Buyadzhi, V. V.; Glushkov, A. V.; Khetselius, O. Y.; Kuznetsova, A. A.; Buyadzhi, A. A.; Prepelitsa, G. P.; Ternovsky, V. B. Nonlinear dynamics of laser systems with elements of a chaos: Advanced computational code. *J. Phys.: Conf. Ser.* **2017**, 905, 012007.
- [6]. Glushkov, A. V. *Atom in an electromagnetic field*. KNT: Kiev, **2005**.
- [7]. Glushkov, A.; Khetselius, O.; Svinarenko, A.; Buyadzhi, V. *Spectroscopy of autoionization states of heavy atoms and multiply charged ions*. Odessa: TEC, **2015**.
- [8]. Abarbanel, H. D. I.; Brown, R.; Sidorowich, J. J.; Tsimring, L. Sh. The analysis of observed chaotic data in physical systems. *Rev. Mod. Phys.* **1993**, 65, 1331-1392.
- [9]. Packard, N. H.; Crutchfield, J. P.; Farmer, J. D.; Shaw, R. S. Geometry from a time series. *Phys. Rev. Lett.* **1980**, 45, 712-716.
- [10]. Gallager, R. *Information theory and reliable communication*. Wiley: N. -Y., **1986**.
- [11]. Grassberger, P.; Procaccia, I. Measuring the strangeness of strange attractors. *Physica D.* **1983**, 9, 189-208.
- [12]. Theiler, J.; Eubank, S.; Longtin, A.; Galdrikian, B.; Farmer, J. Testing for nonlinearity in time series: The method of surrogate data. *Physica D.* **1992**, 58, 77-94.
- [13]. Khetselius, O. Yu. Forecasting evolutionary dynamics of chaotic systems using advanced non-linear prediction method. *Dynamical Systems Applications*; Awrejcewicz, J., Kazmierczak, M., Olejnik, P., Mrozowski, J., Eds.; Lodz Univ.: Lodz, 2013; Vol. T2, pp 145-152.
- [14]. Glushkov, A. V.; Khetselius, O. Y.; Brusentseva, S. V.; Zaichko, P. A.; Ternovsky, V. B. Studying interaction dynamics of chaotic systems within a non-linear prediction method: application to neurophysiology. *Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence, Ser.: Recent Adv. in Computer Eng.*; Balicki, J., Ed.; WSEAS: Gdansk, **2014**; Vol. 21, pp 69-75.
- [15]. Glushkov, A. V.; Svinarenko, A. A.; Buyadzhi, V. V.; Zaichko, P. A.; Ternovsky, V. B. Chaos-geometric attractor and quantum neural networks approach to simulation chaotic evolutionary dynamics during perception process. *Advances in Neural Networks,*

- Fuzzy Systems and Artificial Intelligence, Series: Recent Adv. in Computer Eng.*; Balicki, J., Ed.; WSEAS: Gdansk, **2014**; Vol. 21, pp 143-150.
- [16]. Glushkov, A. V.; Malinovskaya, S. V.; Loboda, A. V.; Shpinareva, I. M.; Gurnitskaya, E. P.; Korchevsky, D. A. Diagnostics of the collisionally pumped plasma and search of the optimal plasma parameters of x-ray lasing: calculation of electron-collision strengths and rate coefficients for Ne-like plasma. *J. Phys.: Conf. Ser.* **2005**, *11*, 188-198.
- [17]. Glushkov, A. V.; Malinovskaya, S. V.; Gurnitskaya, E. P.; Khetselius, O. Yu.; Dubrovskaya Yu. V. Consistent quantum theory of recoil induced excitation and ionization in atoms during capture of neutron. *J. Phys. Conf. Ser.* **2006**, *35*, 425-430.
- [18]. Khetselius, O. Yu. *Hyperfine structure of atomic spectra*. Astroprint: Odessa, **2008**.
- [19]. Khetselius, O. Yu. Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes. *Int. Journ. Quant. Chem.* **2009**, *109*, 3330-3335.
- [20]. Khetselius, O. Yu. Hyperfine structure of radium. *Photoelectronics.* **2005**, *14*, 83-85.
- [21]. Khetselius, O. Yu. Spectroscopy of cooperative electron-gamma-nuclear processes in heavy atoms: NEET effect. *J. Phys. Conf. Ser.* **2012**, *397*, 012012.
- [22]. Glushkov, A. V.; Khetselius, O. Y.; Svinarenko, A. A. Relativistic theory of cooperative muon- γ -nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge. *Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics*; Hoggan, P., Brändas, E., Maruani, J., Delgado-Barrio, G., Piecuch, P., Eds.; Springer: Cham, **2012**; Vol. 22, pp 51-68.
- [23]. Glushkov, A. V.; Malinovskaya, S. V. Cooperative laser nuclear processes: border lines effects. *New projects and new lines of research in nuclear physics*. Fazio, G., Hanappe, F., Eds.; World Scientific: Singapore, **2003**; pp 242-250.

Стаття надійшла до редакції 16.10.2018 р.

PACS 42.55.-f; UDC 539.184

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150497>

A CHAOS-DYNAMICAL APPROACH TO ANALYSIS, PROCESSING AND FORECASTING MEASUREMENTS DATA OF THE CHAOTIC QUANTUM AND LASER SYSTEMS AND SENSORS

A. V. Glushkov¹, V. V. Buyadzhi¹, V. B. Ternovsky², A. V. Ignatenko¹, A. A. Kuznetsova², A. Mashkantsev¹

¹Odessa State Environmental University, L'vovskaya str. 15, 65016, Odessa

²National University "Odessa Maritime Academy", Didrikhson str. 8, 65028, Odessa

E-mail: glushkovav@gmail.com

Summary

The aim of the work is to develop and present a new effective approach to analysis and processing the measurements data of chaotic quantum and laser systems and quantum devices (sensors),

which are of a great importance for different applications in quantum optics and atomic spectroscopy, quantum and nano- and sensor electronics etc.

In the paper we consider new mathematical and computational tools for analysis and processing the measurements data of chaotic quantum and laser systems and quantum devices (sensors). The chaos-geometric approach proposed includes a combined group of non-linear analysis and chaos theory methods such as the autocorrelation function method, multi-fractal formalism, wavelet analysis, mutual information approach, correlation integral analysis, false nearest neighbour algorithm, Lyapunov's exponents and Kolmogorov entropy analysis, surrogate data method, memory functions, neural networks algorithms. There are presented the most effective schemes for computing the Lyapunov's exponents spectrum, Kaplan-Yorke dimension, Kolmogorov entropy etc.

Keywords: chaotic quantum systems and quantum sensors – analysis and processing the measurements data – chaos-geometric approach

PACS 42.55.-f; УДК 539.184

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150497>

ХАОС-ДИНАМІЧНИЙ ПІДХІД ДО АНАЛІЗУ, ОБРОБКИ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ ДАНИХ ВИМІРЮВАННЯ ДЛЯ ХАОТИЧНИХ КВАНТОВИХ СИСТЕМ І СЕНСОРІВ

*О. В. Глушков¹, В. В. Буяджи¹, В. Б. Терновський², Г. В. Ігнатенко¹, Г. О. Кузнєцова²,
О. Машиканцев¹*

¹Одеський державний екологічний університет, Львівська 15, 65016, Одеса

²Національний університет “Одеська морська академія”, Дідріхсона 8, 65028, Одеса

Реферат

Метою роботи є розробка та представлення нового ефективного підходу до аналізу та обробки даних вимірювань для хаотичних квантових і лазерних систем та квантових приладів (датчиків), які мають велике значення для різних застосувань у квантовій оптиці та атомній спектроскопії, квантовій, нано-і сенсорній електроніці тощо.

Стаття присвячена проблемі розробки нових математичних і обчислювальних засобів для аналізу і обробки даних вимірювань хаотичних квантових і лазерних систем і квантових пристроїв (сенсорів). Пропонується хаос-геометричний підхід, який включає об'єднану групу методів нелінійного аналізу та теорії хаосу, таких як метод автокореляційної функції, мультифрактальний формалізм, вейвлет-аналіз, метод взаємної інформації, метод кореляційного інтеграла, алгоритми помилкових найближчих сусідів і сурогатних даних, аналіз на основі показників Ляпунова і ентропії Колмогорова, формалізм функцій пам'яті, нейромережеві алгоритми і ін. Представлені найбільш ефективні схеми обчислення спектра показників Ляпунова, розмірності Каплана-Йорка, ентропії Колмогорова тощо.

Ключові слова: хаотичні квантові системи і квантові сенсори – аналіз і обробка даних вимірювань – хаос-геометричний підхід

ОПТИЧНІ, ОПТОЕЛЕКТРОННІ І РАДІАЦІЙНІ СЕНСОРИ

OPTICAL AND OPTOELECTRONIC AND RADIATION SENSORS

PACS 31.15.A-; UDC 539.184

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150501>

OPTIMIZED RELATIVISTIC OPERATOR PERTURBATION THEORY IN SPECTROSCOPY OF MULTIELECTRON ATOM IN AN ELECTROMAGNETIC FIELD: SENSING SPECTRAL PARAMETERS

A. A. Kuznetsova¹, A. V. Glushkov², M. Yu. Gurskaya², A. A. Buyadzhi¹, V. B. Ternovsky²

¹ National University “Odessa Maritime Academy”, Didrikhson str. 8, Odessa, Ukraine

² Odessa State Environmental University, L'vovskaya str. 15, Odessa, 65016, Ukraine

E-mail: kuznetsovaa232@gmail.com

OPTIMIZED RELATIVISTIC OPERATOR PERTURBATION THEORY IN SPECTROSCOPY OF MULTIELECTRON ATOM IN A DC ELECTRIC FIELD: SENSING SPECTRAL PARAMETERS

A. A. Kuznetsova, A. V. Glushkov, M. Yu. Gurskaya, A. A. Buyadzhi, V. B. Ternovsky

Abstract. It is developed the optimized version of relativistic operator perturbation theory approach to calculation of the Stark resonances energies characteristics (energies and widths) for the multielectron atomic systems in an electromagnetic field. A new approach allows to perform an accurate, consistent treatment of a strong field DC(AC) Stark effect and includes the physically reasonable distorted-waves approximation in the frame of the formally exact relativistic quantum-mechanical procedure. As illustration, some test data for the Stark resonances energies and widths in the heavy multielectron atoms (caesium, francium) are presented and compared with results of

calculations within the alternative consistent sophisticated methods etc.

Keywords: multielectron atom in an electromagnetic field – modified relativistic operator perturbation theory – Stark resonances

ОПТИМІЗОВАНА РЕЛЯТИВІСТСЬКА ОПЕРАТОРНА ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ В СПЕКТРОСКОПІІ БАГАТОЕЛЕКТРОННОГО АТОМУ В ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ: ДЕТЕКТУВАННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ ПАРАМЕТРІВ

Г. О. Кузнецова, А. В. Глушков, М. Ю. Гурська, А. А. Буяджи, В. Б. Терновський

Анотація. Розроблена оптимізована версія нового методу релятивістської операторної теорії збурень з метою обчислення характеристик штарківських резонансів (енергії і ширини) для багатоелектронних атомних систем в електромагнітному полі. Новий підхід дозволяє виконати кількісно прецизійний і теоретично послідовний опис сильно-польового (ДС, АС) ефекту Штарка і включає в себе фізично обґрунтоване наближення перекручених хвиль в рамках формально точної релятивістської квантово-механічної процедури. В якості ілюстрації представлені деякі тестові дані для енергій і ширини штарківських резонансів у важких багатоелектронних атомах (цезій, францій), які порівнюються з результатами розрахунків в рамках альтернативних послідовних методів.

Ключові слова: багатоелектронний атом в електромагнітному полі - модифікована релятивістська операторна теорія збурень - штарківські резонанси

ОПТИМИЗИРОВАННАЯ РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ОПЕРАТОРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ В СПЕКТРОСКОПИИ МНОГОЭЛЕКТРОННОГО АТОМА В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ: ДЕТЕКТИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ

А. А. Кузнецова, А. В. Глушков, М. Ю. Гурская, А. А. Буяджи, В. Б. Терновский

Аннотация. Разработана оптимизированная версия нового метода релятивистской операторной теории возмущений с целью вычисления характеристик энергий штарковских резонансов (энергии и ширины) для многоэлектронных атомных систем в электромагнитном поле. Новый подход позволяет выполнить количественно прецизионное и теоретически последовательное описание сильнополевого (ДС, АС) эффекта Штарка и включает в себя физически обоснованное приближение искаженных волн в рамках формально точной релятивистской квантово-механической процедуры. В качестве иллюстрации представлены некоторые тестовые данные для энергий и ширины штарковских резонансов в тяжелых многоэлектронных атомах (цезий, франций), которые сравниваются с результатами расчетов в рамках альтернативных последовательных методов.

Ключевые слова: многоэлектронный атом в электромагнитном поле - модифицированная релятивистская операторная теория возмущений - штарковские резонансы

1. Introduction

Studying optical and spectral, radiative and autoionization characteristics of the multielectron atomic systems in a electromagnetic fields is traditionally of a great importance and actuality for further development quantum optics and atomic spectroscopy, quantum and nano-and sensor electronics and different applications in the plasma chemistry, astrophysics, laser physics etc. (see Refs. [1–17]). The calculational difficulties of the standard theoretical quantum mechanical approaches to the multielectron atoms in a strong electromagnetic (electric) field are well known. Here one should remember about such phenomenon as the well-known Dyson one for a strong field AC, DC Stark effect. Besides, in contrast to the hydrogen atom, the non-relativistic Schrödinger and relativistic Dirac equations for an electron moving in the field of the atomic core in many-electron atom and a uniform external electric field does not allow separation of variables in the parabolic coordinates. The known quasiclassical (WKB) approximation overcomes these difficulties for the states lying far from the “new continuum” boundary. The detailed review of a modern states of art for spectroscopy of multielectron atoms in an electric (laser) field is presented in Refs. [16–19].

In this paper we present the theoretical basis of the optimized version of relativistic operator perturbation theory (ROPT) approach to calculation of the Stark resonances energies characteristics (energies and widths) for the multielectron atomic systems in an electromagnetic field. A new approach allows to perform an accurate, consistent treatment of a strong field DC(AC) Stark effect and includes the physically reasonable distorted-waves approximation in the frame of the formally exact relativistic quantum-mechanical procedure. The relativistic density-functional approximation with the Kohn-Sham potential is taken as the zeroth approximation in the relativistic many-body perturbation theory (RMBPT) formalism. There have taken into account all exchange-correlation corrections of the second order and dominated classes of the higher orders diagrams (polarization interaction, quasiparticles screening, etc.). New form of the

multi-electron polarization functional has been used. As illustration of application of the presented formalism, new data on the energy and spectral parameters for heavy alkali atoms in an electric (electromagnetic) field are presented.

2. Relativistic operator and many-body perturbation theory for multielectron atoms in an electromagnetic field

Here we present a new relativistic quantum approach to modelling the chaotic dynamics of atomic systems in a dc electric and ac electromagnetic fields, based on the theory of quasi-stationary quasi-energy states, optimized operator perturbation theory, method of model-potential, a complex rotation coordinates algorithm method [16,17]. The universal chaos-geometric block will be used further to treat the chaotic ionization characteristics for a number of heavy atomic systems.

Let us remind that in the case of the electromagnetic field atomic Hamiltonian is usually as follows:

$$H = \frac{1}{2} p^2 + V_{at}(r) + zF_0 \cos(\omega t). \quad (1)$$

The field is periodic, of course one should use the Floquet theorem; then the eigen-Floquet states and quasi-energies E_j are defined as the eigen-functions and eigen-values of the Floquet Hamiltonian \hat{H}_F . In the general form with using the method of complex coordinates the problem reduces to the solution of stationary Schrödinger equation, which is as follows in the model potential approximation:

$$(-1/2 \cdot \nabla^2 + V_{at}(r) + \omega L_z + F_0 z) \Psi_E(r) = E \Psi_E(r) \quad (2)$$

i.e. to the stationary eigen-values and eigen-vectors task for some matrix A (with the consideration of several Floquet zones): $(A - E_j B)|E_j\rangle = 0$. As a decomposition basis, system of the Sturm functions of the operator perturbation theory basis is used. In relativistic theory one should start from the Dirac Hamiltonian (in relativistic units):

$$H = \alpha p + \beta - \alpha Z / r_i + \sqrt{\alpha} F z. \quad (3)$$

Here a field strength intensity is expressed in the relativistic units ($F_{rel} = a^{5/2} F_{at.un.}$; a is the fine structure constant). One could see that a relativistic wave function in the Hilbert space is a bispinor. Using the formal transformation of coordinates $r \rightarrow r \exp(i\theta)$ in the Hamiltonian (3), one could get:

$$H(\theta) = (\alpha c p - Z/r) \exp(-i\theta) + \beta - \sqrt{\alpha} F z \exp(i\theta) \quad (4)$$

In comparison with an analogous non-relativistic theory, here there is arisen a technical problem. In formulae (4) there is term b , which can not be simply transformed. One of the solving receptions as a limitation of a sub-space of the Hamiltonian eigen-functions by states of the definite symmetry (momentum J and parity P). These states can be described by the following functions:

$$\Psi_{PJ}^M = 1/r \begin{pmatrix} f(r) Y_{lJ}^M(n, \sigma) \\ g(r) Y_{l'J}^M(n, \sigma) \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Here $l(l')$ and spin $1/2$ in the coupling scheme give a state with the total momentum J and its projection $M_J = M$. Action of the Hamiltonian on the functions (5) with definite J results in:

$$\hat{H}(\theta) \Psi_{PJ}^M = \alpha_r \left(\hat{p}_r - \frac{i\omega(J+1/2)}{r} \right) \beta \exp(-i\theta) \Psi_{PJ}^M + \left(\beta - \frac{\alpha Z}{r} \exp(-i\theta) - \sqrt{\alpha} F z \exp(-i\theta) \right) \Psi_{PJ}^M, \quad (6)$$

where $\alpha_r = \begin{pmatrix} 0 \dots \sigma n \\ \sigma n \dots \end{pmatrix}$, $\beta = \begin{pmatrix} 1 \dots 0 \\ 0 \end{pmatrix}$,

$p_r = -i(1/r)(d/dr)r$, $\vec{n} = \vec{r}/r$, σ - the Pauli matrices; parameter $\omega = -1$, if $l = J - 1/2$ and $\omega = 1$, if $l = J + 1/2$. In order to further diagonalize the Hamiltonian (6), we need to choose the correct basis of functions in the subspace (5), in particular, by choosing the following functions (the sitter or water-like type):

$$\Psi_{PJ}^{a,M} = 1/r \begin{pmatrix} F(r) Y_{lJ}^M(n, \sigma) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$\Psi_{PJ}^{b,M} = 1/r \begin{pmatrix} 0 \\ iG(r) Y_{l'J}^M(n, \sigma) \end{pmatrix}. \quad (8)$$

It is easy to see that the matrix elements (6) will be no-zeroth only between the states with

the same M_J . In fact this moment is a single limitation of the whole approach. Transformation of co-ordinates in the Pauli Hamiltonian (in comparison with the Schrodinger equation Hamiltonian it contents additional potential term of a magnetic dipole in an external field) can be performed by the analogous way. However, procedure in this case is significantly simplified. They can be expressed through the set of one-dimensional integrals, described in details in Refs. [14-17]. In Ref. [17] it is presented an effective scheme, which provides a general receipt to combine the OPT method with the RMBPT in spherical coordinates for a free atom. The details of the used method can be found in the references [17].

In Ref [17,20] it is presented our version of the RMBPT approach to calculation of spectra and spectral parameters of the multielectron atoms. It is clear that the spectra of multielectron heavy atoms have essentially relativistic properties. So, correct theoretical method of their studying can be based on the convenient field procedure, which includes computing the energy shifts ΔE of the degenerate electron states. More exactly, speech is about constructing secular matrix M (with using the Gell-Mann and Low adiabatic formula for ΔE), which is already complex in the relativistic theory, and its further diagonalization [21,22]. In result one could compute the energies and decay probabilities of a non-degenerate excited state for a complex atomic system. The secular matrix elements can be further expanded into a PT series on the inter-electron interaction. Here the standard Feynman diagrammatic technique is usually used. Generally speaking, the secular matrix M can be represented as follows:

$$M = M^{(0)} + M^{(1)} + M^{(2)} + M^{(3)} + \dots + M^{(k)}, \quad (9)$$

where $M^{(0)}$ is the contribution of the vacuum diagrams of all PT orders (this contribution determines only the general levels spectrum shift); $M^{(1)}$, $M^{(2)}$, $M^{(3)}$ are contributions of the 1-, 2- and 3- quasiparticle (QP) diagrams respectively. The matrix $M^{(1)}$ can be presented as a sum of the independent one-QP contributions. Substituting these quantities into (9) one could have sum-

marized all the one-QP diagrams contributions. In the empirical methods here one could use the experimental values of one-electron energies, however, the necessary experimental quantities (especially for the rare-earth and other elements) are not often available. The detailed procedure for computing $\text{Re}M^{(2)}$ is presented, for example, in Ref. [21,22].

We will describe an atomic multielectron system by the relativistic Dirac Hamiltonian (the atomic units are used) as follows [20,23-25]:

$$H = \sum_i \{ \alpha p_i - \beta e^2 - Z/r_i \} + \sum_{i>j} \exp(i|\omega|r_{ij})(1 - \alpha_i \alpha_j)/r_{ij}, \quad (11)$$

where Z is a charge of nucleus, a_i, a_j are the Dirac matrices, ω_{ij} is the transition frequency, c – the velocity of light. The interelectron interaction potential (second term in (3)) takes into account the retarding effect and magnetic interaction in the lowest order on parameter of the fine structure constant. In the PT zeroth approximation it is used ab initio mean-field potential:

$$V^{DKS}(r) = [V_{Coul}^D(r) + V_x(r) + V_c(r|a)], \quad (12)$$

with the standard Coulomb, exchange Kohn-Sham V_x and correlation Lundqvist-Gunnarsson V_c potentials (look details in Refs. [18-20]). An effective approach to accounting the multi-electron polarization contributions is described earlier and based on using the effective two-QP polarizable operator, which is included into the PT first order matrix elements.

3. Some results and conclusions

As illustration of the possibilities of the presented approach we carried out computing a dependence of the Stark components energies $(j, |m_j|)$ upon electric field strength F_0 for the Rydberg states $nD_{3/2,5/2}$ ($n=39-46$) of the Cs and Fr atoms (look figure 1) and compared the obtained results with the empirical perturbation theory calculation results by Zhao et al [4].

Analysis of the data shows that the positions (energies) of the Stark resonances in the present calculation are in a physically reasonable agreement with theoretical data obtained by Zhao et al and experimental results. However, it should be noted that the results for the width of resonance could differ more significantly from each

other. As it has been underlined in [40], in the case of a weak electric field (naturally the widths of resonances became very small), the methods have difficulties in obtaining a stable value of a width. In order to obtain the well-converged results, it is necessary to use larger basis size. Naturally, in a limit of a weak electric field the well-known quasiclassical WKB approximation and standard PT calculation will be more appropriate. One of the serious advantages of the modified ROPT method is that an increasing a field strength does not lead to an increase of computational effort and there is no a convergence problem [17].

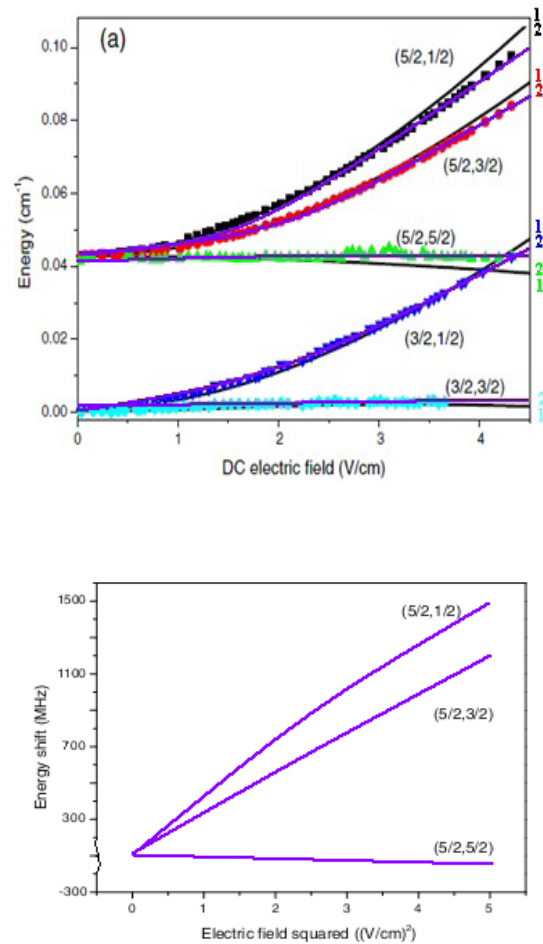


Figure 1 (a) – Dependence of energy (cm⁻¹; the energy of the level for $F_0=0$ is accepted as zero) of the Stark components $(j, |m_j|)$ for the state 39D Cs upon the electric field strength F_0 (Experiment- $\square, \circ, \Delta, \diamond$); Theory: 1 – empirical perturbation theory (on F_0) data by Zhao et al; 2 – our data; (b) – the Stark shift (MHz) for different $(j, |m_j|)$ for the state 44D Fr upon (our data)

References

- [1]. Glushkov, A. V. *Atom in an electromagnetic field*. KNT: Kiev, **2005**.
- [2]. Rao, J.; Liu, W.; Li, B. Theoretical complex Stark energies of hydrogen by a complex-scaling plus B-spline approach. *Phys. Rev. A*. **1994**, *50*, 1916-1919 (1994).
- [3]. Rao, J.; Li, B. Resonances of the hydrogen atom in strong parallel magnetic and electric fields. *Phys. Rev. A*. **1995**, *51*, 4526-4530.
- [4]. Zhi-Gang, Feng; Lin-Jie, Zhang; Jian-Ming, Zhao; Chang-Yong, Li; Suo-Tang, Jia. Lifetime measurement of ultracold caesium Rydberg states. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **2009**, *42*, 145303.
- [5]. Glushkov, A. V.; Loboda, A. V.; Gurnitskaya, E. P.; Svinarenko, A. A. QED theory of radiation emission and absorption lines for atoms in a strong laser field. *Phys. Scripta*. **2009**, *T135*, 014022.
- [6]. Ignatenko, A. V. Probabilities of the radiative transitions between Stark sublevels in spectrum of atom in an DC electric field: New approach. *Photoelectronics*, **2007**, *16*, 71-74.
- [7]. Buyadzhi, V. V. Laser multiphoton spectroscopy of atom embedded in Debye plasmas: multiphoton resonances and transitions. *Photoelectronics*. **2015**, *24*, 128-133.
- [8]. Glushkov, A. V. Spectroscopy of atom and nucleus in a strong laser field: Stark effect and multiphoton resonances. *J. Phys.: Conf. Ser.* **2014**, *548*, 012020.
- [9]. Glushkov, A. V.; Malinovskaya, S. V.; Gurnitskaya, E. P.; Khetselius, O. Yu.; Dubrovskaya Yu. V. Consistent quantum theory of recoil induced excitation and ionization in atoms during capture of neutron. *J. Phys. Conf. Ser.* **2006**, *35*, 425-430.
- [10]. Khetselius, O. Yu. Spectroscopy of cooperative electron-gamma-nuclear processes in heavy atoms: NEET effect. *J. Phys.: Conf. Ser.* **2012**, *397*, 012012.
- [11]. Khetselius, O. Yu. Relativistic Energy Approach to Cooperative Electron- γ -Nuclear Processes: NEET Effect *In Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*; Nishikawa, K., Maruani, J., Brändas, E., Delgado-Barrio, G., Piecuch, P., Eds.; Springer: Dordrecht, **2012**; Vol. 26, pp 217-229.
- [12]. Glushkov, A. V.; Malinovskaya S. V. Co-operative laser nuclear processes: border lines effects *In New Projects and New Lines of Research in Nuclear Physics*. Fazio, G., Hanappe, F., Eds.; World Scientific: Singapore, **2003**, 242-250.
- [13]. Glushkov, A. V. Energy approach to resonance states of compound superheavy nucleus and EPPP in heavy nuclei collisions *In Low Energy Antiproton Physics*; AIP: New York, *AIP Conf. Proc.* **2005**, *796*, 206-210.
- [14]. Glushkov A. V.; Ivanov, L. N. DC strong-field Stark effect: consistent quantum-mechanical approach. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **1993**, *26*, L379-386.
- [15]. Glushkov, A. V.; Ambrosov, S. V.; Ignatenko, A. V.; Korchevsky, D. A. DC strong field Stark effect for nonhydrogenic atoms: Consistent quantum mechanical approach. *Int. Journ. Quant. Chem.* **2004**, *99*, 936-939.
- [16]. Glushkov, A. V. Operator Perturbation Theory for Atomic Systems in a Strong DC Electric Field. *In Advances in Quantum Methods and Applications in Chemistry, Physics, and Biology, Series: Progress in Theoretical Chemistry and Physics*; Hotokka, M., Brändas, E., Maruani, J., Delgado-Barrio, G., Eds.; Springer: Cham, **2013**; Vol. 27, pp 161-177.
- [17]. Kuznetsova, A. A.; Glushkov, A. V.; Ignatenko, A. V.; Svinarenko, A. A.; Ternovsky V. B. Spectroscopy of multielectron atomic systems in a DC electric field. *Adv. Quant. Chem. (Elsevier)* **2018**, *78*, doi.org/10.1016/bs.aiq.2018.06.005.
- [18]. Glushkov, A. V. *Relativistic Quantum theory. Quantum mechanics of atomic systems*. Astroprint: Odessa, **2008**.
- [19]. Glushkov, A.; Khetselius, O.; Svinarenko, A.; Buyadzhi, V. *Spectroscopy of autoionization states of heavy atoms and multiply charged ions*. Odessa: TEC, **2015**.
- [20]. Glushkov, A.; Khetselius, O.; Svinarenko, A.; Buyadzhi, V.; Ternovsky, V.;

- Kuznetsova, A.; Bashkarev, P. Relativistic perturbation theory formalism to computing spectra and radiation characteristics: Application to heavy elements *Recent Studies in Perturbation Theory*; Uzunov, D. Ed.; In-Tech, **2017**; pp 131-150.
- [21]. Ivanova, E. P.; Glushkov, A. V. Theoretical investigation of spectra of multicharged ions of F-like and Ne-like isoelectronic sequences. *J. Quant. Spectr. Rad. Transfer*. 1986, *36*, 127-145.
- [22]. Glushkov, A. V.; Ivanov, L. N.; Ivanova, E. P. Autoionization Phenomena in Atoms. *Moscow University Press*, Moscow, **1986**, 58-160.
- [23]. Khetselius, O. Yu. *Hyperfine structure of atomic spectra*. Astroprint: Odessa, **2008**.
- [24]. Khetselius, O. Yu. Hyperfine structure of radium. *Photoelectronics*. **2005**, *14*, 83-85.
- [25]. Khetselius, O. Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes. *Int. Journ. Quant. Chem.* **2009**, *109*, 3330-3335.
- [26]. Glushkov, A. V.; Malinovskaya, S. V.; Loboda, A. V.; Shpinareva, I. M.; Gurnitskaya, E. P.; Korchevsky, D. A. Diagnostics of the collisionally pumped plasma and search of the optimal plasma parameters of x-ray lasing: calculation of electron-collision strengths and rate coefficients for Ne-like plasma. *J. Phys.: Conf. Ser.* **2005**, *11*, 188-198.

Стаття надійшла до редакції 16.10.2018 р.

PACS 31.15.A-; UDC 539.184

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150501>

OPTIMIZED RELATIVISTIC OPERATOR PERTURBATION THEORY IN SPECTROSCOPY OF MULTIELECTRON ATOM IN AN ELECTROMAGNETIC FIELD: SENSING SPECTRAL PARAMETERS

A. A. Kuznetsova¹, A. V. Glushkov², A. A. Buyadzhi², M. Yu. Gurskaya², V. B. Ternovsky²

¹National University "Odessa Maritime Academy", Didrikhson str. 8, 65028, Odessa

²Odessa State Environmental University, L'vovskaya str. 15, 65016, Odessa

E-mail: kuznetsovaa232@gmail.com

Summary

The aim of the work is to develop and present a new effective approach to analysis and calculation of the energy and spectral parameters of heavy multielectron atoms in an electromagnetic field, which are of a great importance for different applications in quantum optics and atomic spectroscopy, quantum and nano- and sensor electronics, plasma chemistry, astrophysics, laser physics etc.

It is developed the optimized version of relativistic operator perturbation theory approach to calculation of the Stark resonances energies characteristics (energies and widths) for the multielectron atomic systems in an electromagnetic field. A new approach allows to perform an accurate, consistent treatment of a strong field DC(AC) Stark effect and includes the physically reasonable distorted-waves approximation in the frame of the formally exact relativistic quantum-mechanical procedure. As illustration, some test data for the Stark resonances energies and widths in the heavy

multielectron atoms (caesium, francium) are presented and compared with results of calculations within the alternative consistent sophisticated methods etc

Keywords: multielectron atom in an electromagnetic field – modified relativistic operator perturbation theory – Stark resonances

PACS 31.15.A-; УДК 539.184

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150501>

ОПТИМІЗОВАНА РЕЛЯТИВІСТСЬКА ОПЕРАТОРНА ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ В СПЕКТРОСКОПІ БАГАТОЕЛЕКТРОННОГО АТОМУ В ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ: ДЕТЕКТУВАННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ ПАРАМЕТРІВ

Г. О. Кузнецова¹, А. В. Глушков², А. А. Буяджи², М. Ю. Гурська², В. Б. Терновський¹

¹ Національний університет “Одеська морська академія”, Дідріхсона 8, 65028, Одеса

² Одеський державний екологічний університет, Львівська 15, 65016, Одеса

Реферат

Метою роботи є розробка та обґрунтування нового ефективного підходу до аналізу та розрахунку енергетичних та спектральних параметрів важких багатоелектронних атомів в електромагнітному полі, чисельні величини яких мають велике значення для різних застосувань у квантовій оптиці та атомній спектроскопії, квантовій, нано-і сенсорній електроніці, хімії плазми, астрофізиці, лазерній фізиці тощо.

Розроблена оптимізована версія нового методу релятивістської операторної теорії збурень з метою обчислення характеристик штарківських резонансів (енергії і ширини) для багатоелектронних атомних систем в електромагнітному полі. Новий підхід дозволяє виконати кількісно прецизійний і теоретично послідовний опис сильнопольового (DC, AC) ефекту Штарка і включає в себе фізично обґрунтоване наближення перекручених хвиль в рамках формально точної релятивістської квантово-механічної процедури. В якості ілюстрації представлені деякі тестові дані для енергій і ширин штарківських резонансів у важких багатоелектронних атомах (цезій, францій), які порівнюються з результатами розрахунків в рамках альтернативних теоретичних методів.

Ключові слова: багатоелектронний атом в електромагнітному полі - модифікована релятивістська операторна теорія збурень - штарківські резонанси

ОПТИЧНІ, ОПТОЕЛЕКТРОННІ І РАДІАЦІЙНІ СЕНСОРИ

OPTICAL AND OPTOELECTRONIC AND RADIATION SENSORS

PACS 33.20.-t; UDC 539.186

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150505>

PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY OF DIATOMIC MOLECULES: HYBRID DENSITY FUNCTIONAL AND GREEN'S FUNCTIONS APPROACH TO SENSING MOLECULAR CONSTANTS

A. V. Ignatenko, A. V. Glushkov, O. Yu. Khetselius, Yu. Ya. Bunyakova, A. A. Svinarenko

Odessa State Environmental University, 15, Lvovskaya str., Odessa, 65016, Ukraine
E-mail: ignatenkoav13@gmail.com

PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY OF DIATOMIC MOLECULES: HYBRID DENSITY FUNCTIONAL AND GREEN'S FUNCTIONS APPROACH TO SENSING MOLECULAR CONSTANTS

A. V. Ignatenko, A. V. Glushkov, O. Yu. Khetselius, Yu. Ya. Bunyakova, A. A. Svinarenko

Abstract. It is developed the optimized version of the hybrid combined density functional theory (DFT) and the Green's-functions (GF) approach to quantitative treating the diatomic photoelectron spectra and molecular constants. The Fermi-liquid quasiparticle version of the density functional theory is used. The density of states, which describe the vibrational structure in photoelectron spectra, is defined with the use of combined DFT-GF approach and is well approximated by using only the first order coupling constants in the optimized one-quasiparticle approximation. Using the combined DFT-GF approach leads to significant simplification of the calculation and increasing an accuracy of theoretical prediction that is confirmed by computing the molecular spectral parameters for the molecules of CH, CO, HF etc.

Keywords: photoelectron spectra of molecules, new hybrid approach, Green's functions, density functional theory

ФОТОЕЛЕКТРОННА СПЕКТРОСКОПІЯ ДВОАТОМНИХ МОЛЕКУЛ: ГІБРИДНИЙ МЕТОД ФУНКЦІОНАЛУ ГУСТИНИ ТА ФУНКЦІЙ ГРИНА У ВИЗНАЧЕННІ МОЛЕКУЛЯРНИХ КОНСТАНТ

Г. В. Ігнатенко, О. В. Глушков, О. Ю. Хецеліус, Ю. Я. Бунякова, А. А. Свиначенко

Анотація. Розвинута оптимізована версія гібридної комбінованої теорії функціоналу густини (DFT) і методу функцій Грина (ГФ) для кількісного опису фотоелектронних спектрів двохатомних молекул та молекулярних констант. Новий гібридний підхід суттєво базується на фермі-рідинній квазічастинній версії теорії функціоналу густини. Густина стану, яка описує коливальну структуру в фотоелектронних спектрах, визначається з використанням комбінованого DFT-GF підходу та фізично розумно апроксимується за допомогою тільки першого порядку констант зв'язку в оптимізованому одноквазічастинковому наближенні. Використання комбінованого DFT-GF підходу призводить до значного спрощення молекулярних обчислень та збільшення точності теоретичного прогнозування, що повністю підтверджується відповідними обчисленнями спектральних параметрів для молекул CH, CO, HF тощо.

Ключові слова: фотоелектронний спектр молекул, новий гібридний підхід, метод функцій Грина, теорія функціонала густини

ФОТОЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ: ГИБРИДНЫЙ МЕТОД ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ И ФУНКЦИЙ ГРИНА В ОПРЕДЕЛЕНИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОНСТАНТ

А. В. Игнатенко, А. В. Глушков, О. Ю. Хецеліус, Ю. Я. Бунякова, А. А. Свиначенко

Аннотация. Разработана оптимизированная версия гибридной комбинированной теории функционала плотности (DFT) и метода функций Грина (GF) для количественного описания фотоэлектронных спектров двухатомных молекул и молекулярных констант. Новый подход существенно базируется на ферми-жидкостной квазічастичной версии теории функционала плотности. Плотность состояний, которая описывают колебательную структуру в фотоэлектронных спектрах, определяется с использованием комбинированного DFT-GF подхода и физически разумно аппроксимируется с использованием только первого порядка констант связи в оптимизированном одноквазічастичном приближении. Использование комбинированного DFT-GF подхода приводит к значительному упрощению молекулярных расчетов и увеличению точности теоретического предсказания, что полностью подтверждается расчетами молекулярных спектральных параметров для молекул CH, CO, HF и др.

Ключевые слова: фотоэлектронный спектр молекул, новый гибридный подход, метод функций Грина, теория функционала плотности

1. Introduction

The Green's function (GF) method is very well known in a quantum theory of field, quantum electrodynamics, quantum theory of solids. This approach naturally provided the known progress in treating atoms, solids and molecules, as it has been shown in many papers (c.f.[1-4]). The experimental photoelectron spectra (PES) of molecules usually show a pronounced vibrational structure [1,2]. Many papers have been devoted to treatment of the vibrational spectra by construction of potential curves for the reference molecule (the molecule which is to be ionized) and the molecular ion. Usually the electronic GF is defined for fixed position of the nuclei. The cited method, however, requires as input data the geometries, frequencies, and potential functions of the initial and final states. Since in most cases at least a part of these data are unavailable, the calculations have been carried out with the objective of determining the missing data by comparison with experiment. To avoid this difficulty and to gain additional information about the ionization process, Cederbaum et al [2] extended the GF approach to include the vibrational effects and showed that the GF method allowed *ab initio* calculation of the intensity distribution of the vibrational lines etc. For large molecules far more approximate but more easily applied methods such as DFT [3] or from the wave-function world the simplest correlated model MBPT are preferred [10]. Indeed, in the last decades DFT theory became by a great, quickly developing field of the modern computational chemistry of molecules. In Refs. [4,5] the authors underlined the elements of the generalized approach to vibrational structure in the PES of molecules, which is based on the DFT and the GF approach and presented some numerical illustrations of quantitative treating the carbon oxide molecule parameters. It is important that calculational procedure can be significantly simplified with using DFT formalism in comparison with the classical GF method realization.

In this paper we present the optimized version of the hybrid combined DFT-GF approach to quantitative treating the diatomic photoelec-

tron spectra. The approach is based on the GF method in the Cederbaum-Domske version [2], Fermi-liquid DFT formalism [6-13] and use of the novel effective density functionals (see also [14-26]). The density of states is well approximated by using only the first order coupling constants in the one-particle approximation. It is important that the calculational procedure is significantly simplified with using the quasiparticle DFT formalism. Thus quite simple method becomes a powerful tool in interpreting the vibrational structure of photoelectron spectra for different molecular systems.

2. The hybrid quasiparticle DFT- optimized GF approach

As usually, introducing a field operator

\sum with the Har-

tree-Fock (HF) one-particle functions ϕ_i (ϵ are the one-particle HF energies and f denotes the set of orbitals occupied in the HF ground state; R_0 is the equilibrium geometry on the HF level) and dimensionless normal coordinates Q_s one can write the standard Hamiltonian as follows:

$$\begin{aligned}
 H &= H_E + H_N + H_{EN}^{(1)} + H_{EN}^{(2)}, \\
 H_E &= \sum_i \epsilon_i(R_0) a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl}(R_0) a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l - \\
 &\quad - \sum_{i,j} \sum_{k \neq l} [V_{ijk}(R_0) - V_{ikj}(R_0)] a_i^\dagger a_j \\
 H_N &= \hbar \sum_{s=1}^M \omega_s (b_s^\dagger b_s + \frac{1}{2}), \quad H_{EN}^{(1)} = 2^{-1/2} \sum_{s=1}^M \left(\frac{\partial \epsilon_i}{\partial Q_s} \right)_0 (b_s + b_s^\dagger) [a_i^\dagger a_i - n_i] + \\
 &\quad + \frac{1}{4} \sum_{s,s'=1}^M \left(\frac{\partial^2 \epsilon_i}{\partial Q_s \partial Q_{s'}} \right)_0 (b_s + b_s^\dagger)(b_{s'} + b_{s'}^\dagger) [a_i^\dagger a_i - n_i], \\
 H_{EN}^{(2)} &= 2^{-3/2} \sum_{s=1}^M \left(\frac{\partial V_{ijkl}}{\partial Q_s} \right)_0 (b_s + b_s^\dagger) [\delta v_1 a_i^\dagger a_j^\dagger a_k + \\
 &\quad + \delta v_2 a_i a_k a_j^\dagger a_l^\dagger + 2\delta v_3 a_j^\dagger a_k a_l a_i^\dagger] + \\
 &\quad + \frac{1}{8} \sum_{s,s'=1}^M \left(\frac{\partial^2 V_{ijkl}}{\partial Q_s \partial Q_{s'}} \right)_0 (b_s + b_s^\dagger)(b_{s'} + b_{s'}^\dagger) \cdot \\
 &\quad [\delta v_1 a_i^\dagger a_j^\dagger a_k + \delta v_2 a_i a_k a_j^\dagger a_l^\dagger + 2\delta v_3 a_j^\dagger a_k a_l a_i^\dagger]
 \end{aligned} \tag{1}$$

with $n_i=1$ (0), $i \in f$ ($i \notin f$), $\delta \sigma_j=1$ (0), $(ijkl) \in \sigma_{f,\pm}$ where the index set v_1 means that at least i and j or k and l are unoccupied, v_2 that at most one of the orbitals is unoccupied, and v_3 that i and j or k and l are unoccupied. The ϵ_i are the HF frequencies; a_i^\dagger, a_i are destruction and creation operators for vibrational quanta as

$$\begin{aligned}
 Q_s &= (1/\sqrt{2})(b_s + b_s^\dagger), \\
 \partial/\partial Q_s &= (1/\sqrt{2})(b_s - b_s^\dagger).
 \end{aligned} \tag{2}$$

The interpretation of the above Hamiltonian and an exact solution of the one-body HF problem is given in refs. [1,2,4]. The usual way is to define the HF-single-particle component of the Hamiltonian (4) is as in Refs. [1,5]. Correspondingly in the one-particle picture the density of occupied states is given by

$$N_k^0(\epsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\hbar^{-1}(\epsilon - \epsilon_k)t} \langle 0 | e^{\pm i\hbar^{-1}\tilde{H}_0 t} | 0 \rangle, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 = & \sum_{s=1}^M \hbar\omega_s b_s^\dagger b_s + \sum_{s=1}^M g_s^k (b_s + b_s^\dagger) + \\ & + \sum_{s,s'=1}^M \gamma_{ss'}^k (b_s + b_s^\dagger)(b_{s'} + b_{s'}^\dagger) \\ g_s^i = & \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial \epsilon_i}{\partial Q_s} \right)_0, \quad \gamma_{ss'}^i = \pm \frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 \epsilon_i}{\partial Q_s \partial Q_{s'}} \right)_0. \end{aligned} \quad (4)$$

In a diagrammatic method to get function $N_k(\epsilon)$ one should calculate the GF $G_{kk'}(\epsilon)$ first [1,2,5]:

$$G_{kk'}(\epsilon) = -i\hbar^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\hbar^{-1}\epsilon t} \langle \psi_0 | T \{ a_k(t) a_k^\dagger(0) \} | \psi_0 \rangle \quad (6)$$

and the function $N_k(\epsilon)$ can be found from the relation

$$\pi N_k(\epsilon) = a \text{Im} G_{kk}(\epsilon - ai\eta), \quad a = -\text{sign} \epsilon_k. \quad (7)$$

Choosing the unperturbed Hamiltonian to be $\sum_k(\epsilon)$ one could define the GF as follows:

$$\begin{aligned} G_{kk'}^{OB}(t) = & \pm \delta_{kk'} i \exp[-in^{-1}(\epsilon_k \mp \Delta\epsilon)t] \cdot \\ & \cdot \sum_n \langle \hat{n}_k | U_k | 0 \rangle^2 \exp(\pm in_k \cdot \hat{\omega}_k t) \end{aligned} \quad (8)$$

The direct method for calculation of $N_k(\epsilon)$ as the imaginary part of the GF includes a definition of the vertical I.P. (V.I.P.s) of the reference molecule and then of $N_k(\epsilon)$. The zeros of the functions

$$D_k(\epsilon) = \epsilon - [\epsilon^{op} + \Sigma(\epsilon)]_k, \quad (9)$$

where $(\epsilon^{op} + \Sigma)_k$ denotes the k -th eigenvalue of the diagonal matrix of the one-particle energies added to matrix of the self-energy part, are the

negative V. I. P. 's for a given geometry. One can write [1]:

$$\begin{aligned} (V.I.P.)_k = & -(\epsilon_k + F_k), \\ F_k = \Sigma_{kk}(- (V.I.P.)_k) \approx & \frac{1}{1 - \partial \Sigma_{kk}(\epsilon_k) / \partial \epsilon_k} \Sigma_{kk}(\epsilon_k) \end{aligned} \quad (10)$$

Expanding the ionic energy about the equilibrium geometry of the reference molecule in a power series of the normal coordinates of this molecule leads to a set of linear equations in the unknown normal coordinate shifts δQ_s and new coupling constants are then:

$$\begin{aligned} g_i = & \pm (1/\sqrt{2}) [\partial(\epsilon_k + F_k) / \partial Q_i]_0 \\ \gamma_{i' } = & \pm \left(\frac{1}{4} \right) [\partial^2(\epsilon_k + F_k) / \partial Q_i \partial Q_{i'}]_0 \end{aligned} \quad (11)$$

The coupling constants and $\gamma_{i'}$ are calculated by the well-known perturbation expansion of the self-energy part. In second order one obtains:

$$\Sigma_{kk}^{(2)}(\epsilon) = \sum_{\substack{i,j \\ s \neq F}} \frac{(V_{ksij} - V_{ksji}) V_{ksij}}{\epsilon + \epsilon_s - \epsilon_i - \epsilon_j} + \sum_{\substack{i,j \\ s \neq F}} \frac{(V_{ksij} - V_{ksji}) V_{ksij}}{\epsilon + \epsilon_s - \epsilon_i - \epsilon_j} \quad (12)$$

and the coupling constant g_p are written as [2,5]:

$$g_i \approx \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial Q_i} \frac{1 + q_k (\partial / \partial \epsilon) \sum_{kk} [-(V.I.P.)_k]}{1 - (\partial / \partial \epsilon) \sum_{kk} [-(V.I.P.)_k]} \quad (13)$$

The pole strength of the corresponding GF:

$$\begin{aligned} \rho_k = & \left\{ 1 - \frac{\partial}{\partial \epsilon} \sum_{kk} [-(V.I.P.)_k] \right\}^{-1}; \quad \rho_k \geq 0, \\ g_i \approx & g_i^0 [\rho_k + q_k (\rho_k - 1)]_p \\ g_i^0 = & \pm 2^{-1/2} \partial \epsilon_k / \partial Q_i \end{aligned} \quad (14)$$

The above presented results can be usefully treated in the terms of the correlation and reorganization effects. Usually it is introduced the following expression for an I.P.:

$$\begin{aligned} (I.P.)_k = & -\epsilon_k - \sum_{j \in F} \frac{(V_{kij} - V_{kji})}{\epsilon_j - \epsilon_i} - \frac{1}{2} \sum_{i \in F} \frac{(V_{kijl} - V_{klij})}{\epsilon_k + \epsilon_i - \epsilon_j - \epsilon_l} (1 - \delta_{ik}) - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\substack{p,q \in F \\ j \neq F}} \frac{(V_{kjpq} - V_{kjqp})^2}{\epsilon_k + \epsilon_i - \epsilon_p - \epsilon_q} (1 - \delta_{kp}) (1 - \delta_{kq}) \end{aligned} \quad (15)$$

The first correction term is due to reorganization, the remaining correction terms are due to correlation effects. Then the coupling constant g_p can be written as

$$g_i \approx g_i^0 \left\{ 1 + \sum_{j \in F} \frac{(V_{kkkj})^2}{(\epsilon_j - \epsilon_k)^2} - \frac{1}{2} \left[\sum_{\substack{i \in F \\ j, l \in F}} \frac{(V_{kijl} - V_{klij})^2}{(\epsilon_k + \epsilon_i - \epsilon_j - \epsilon_l)^2} (1 - \delta_{ki}) + \sum_{\substack{p, q \in F \\ j, l \in F}} \frac{(V_{kijp} - V_{kjpq})^2}{(\epsilon_k + \epsilon_i - \epsilon_p - \epsilon_q)^2} (1 - \delta_{ki})(1 - \delta_{kp}) \right] \right\}. \quad (16)$$

The second coupling constant can be written

$$\gamma_{ii} = \gamma_{ii}^0 \left(\frac{g_i}{g_i^0} \right) + \frac{1}{4} \sqrt{2} g_i^0 \frac{\partial}{\partial Q_i} \left(\frac{g_i}{g_i^0} \right) \quad (17)$$

γ_{ii}^0 , is defined analogously

The key elements of novelty of our advanced theory are connected with implementation of elements of the quasiparticle Fermi-liquid version of the DFT (QFLDFT) [1-3,8,17] to the GF approach. Let us note that the QFLDFT was developed in Refs. [1-3,8,17] is used to determine the coupling constants etc. The master equations can be obtained on the basis of variational principle with using the corresponding Lagrangian of a molecule L_q . It should be defined as a functional of quasiparticle densities:

$$\begin{aligned} v_0(r) &= \sum_{\lambda} n_{\lambda} |\Phi_{\lambda}(r)|^2, \\ v_1(r) &= \sum_{\lambda} n_{\lambda} |\nabla \Phi_{\lambda}(r)|^2, \\ v_2(r) &= \sum_{\lambda} n_{\lambda} [\Phi_{\lambda}^* \Phi_{\lambda} - \Phi_{\lambda}^* \Phi_{\lambda}]. \end{aligned} \quad (18)$$

The densities v_0 and v_1 are similar to the HF electron density and kinetical energy density correspondingly; the density v_2 has no an analog in the HF or DFT theory and appears as result of account for the energy dependence of the mass operator Σ . A Lagrangian L_q can be written as a sum of a free Lagrangian and Lagrangian of interaction: $L_q = L_q^0 + L_q^{int}$, where the interaction Lagrangian is defined in the form, which is characteristic for a standard DFT (as a sum of the Coulomb and exchange-correlation terms), however, it takes into account for the energy dependence of a mass operator Σ :

$$L_q^{int} = L_K - \frac{1}{2} \sum_{i,k=0}^2 \int \beta_{ik} F(r_1, r_2) v_i(r_1) v_k(r_2) dr_1 dr_2 \quad (19)$$

where F is an effective potential of the exchange-correlation interaction. The constants β_{ik} are defined in Ref. [7]. The single used constant β_{02} can be calculated by analytical way, but it is very useful to remember its connection with a spectroscopic factor F_{sp} of the system [7]:

$$F_{sp} = \left\{ 1 - \frac{\partial}{\partial \epsilon} \sum_{kk} [-(V.I.P.)_k] \right\} \quad (20)$$

The terms $\partial \sum \partial$ and \sum is directly linked [6]. In the terms of the Green function method expression (7) is in fact corresponding to the GF pole strength. The new element of an approach is connected with using the DFT correlation functionals, in particular, the Gunnarsson-Lundqvist, Lee-Yang-Parr ones etc. (look details in ref. [1,22]).

3. Some results and conclusions

In further calculation as potential V_{XC} we use the exchange-correlation pseudo-potential which contains the correlation (Gunnarsson-Lundqvist) potential and relativistic exchanger Kohn-Sham one [1,3]. As an object of studying we choose the diatomic molecules of HF, CH, CO for application of the combined Green's function method and quasiparticle DFT approach. In refs. [2,4] it was presented an analysis and calculation of the photoelectron spectrum for the sufficiently complicated from the theoretical viewpoint molecules such as the N_2 and CO molecules, where the known Koopmans' theorem even fails in reproducing the sequence of the V. I. P.'s in the PES spectrum [1-3]. It is stressing, however it has been possible to get the full sufficiently correct description of the diatomics PES already in the effective one-quasiparticle approximation [1,2,5]. Another essential aspect is sufficiently simple calculational procedure, provided by using the DFT. Moreover, here the cumbersome calculation is not necessary, if the detailed Hartree-Fock (Hartree-Fock-Roothaan) data (separate HF-potential curves of molecule and ion) for the studied diatomic molecule are available. Further it is easily

to estimate the pole strengths p_k and the values q_k . When the change of frequency due to ionization is small, the density of states can be well approximated using only one parameter g :

$$N_k(\epsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-S} \frac{S^n}{n!} \delta(\epsilon - \epsilon_k + \Delta \epsilon_k + n \cdot \hbar \hat{\omega}),$$

$$S = g^2 (\hbar \omega)^{-2}. \quad (21)$$

In case the frequencies change considerably, the intensity distribution of the most intensive lines can analogously be well approximated by an effective parameter S . Below we mean that S^0 denotes the constant S calculated with g^0 and S^{exp} denotes the value derived from the experimental spectrum. The deviations of the one-particle constants g^0 from the experimental ones are practically fully arisen due to the correlation effects. In table 1 the experimental (S^{exp}) and theoretical (S^{th}) values of the S parameter are presented for the molecules of CH, HF: S^0 is the value without accounting for the correlation and reorganization corrections [2]; $S^{(b)}$ – the values of the parameter with accounting correlation and reorganization corrections within the simple (non-optimized) GF-DFT version [5] and the present work results (see [1-5] and Refs. therein).

Table 1.
The experimental (S^{exp}) and theoretical (S^{th}) values of the S parameter are presented for different molecules (CH, HF): S^0 is the value without accounting correlation and reorganization corrections; $S^{(b)}$ – the combined GF-DFT method (b).

Molecule	S	1π	3σ
CH	S^0	0.22	0.105
	$S^{(b)}$	0.27	0.1134
	$S^{\text{(th-this work)}}$	0.38	0.120
HF	S^0	0.126	1.900
	$S^{(b)}$	0.192	2.053
	$S^{\text{(th-this work)}}$	0.313	2.115
	$S^{\text{(exp)}}$	0.35	2.13

It is interesting to list the similar data for the CO molecule: $S^{\text{exp}}(1\pi)=2.30$; $S^{\text{exp}}(4\sigma)=0.27$; $S^{\text{exp}}(5\sigma)=0.04$. It should be noted that more sophisticated calculation by Cederbaum et al [2] gives the theoretical value $S(4,5\sigma)$, which is practically identical to the experimental values, however the value $S(1\pi)=2.59$ is in some degree different from S^{exp} . The similar our data are as follows: $S^{\text{th}}(1\pi)=2.32$; $S^{\text{th}}(4\sigma)=0.268$; $S^{\text{th}}(5\sigma)=0.041$. Note that our data are in physically reasonable agreement with the experimental data. It is interesting to present the data on the ionization potentials of the hydrogen fluoride (say, the ion state $^2\Pi$): the experimental value (16.01 eV), the Koopmans' theorem (17.79 eV), the Hartree-Fock approximation (15.6 eV), the equations-of-motion approach (15.87 eV), this approach with accounting for correlation and reorganization corrections (15.97 eV). This results confirms the result [1-3] that the correlation and reorganization effects are the important corrections to Koopmans' theorem for this specific ionization potential. The most important aspect of all consideration is connected the principal possibility to reproduce diatomic spectra by applying a one-particle theory with accurate accounting for the correlation and reorganization effects. The hybrid DFT-GF theoretical approach can be prospectively used for quantitative treating photoelectron spectra of more complicated diatomic molecules.

References

- [1]. Glushkov, A. V. *Relativistic quantum theory. Quantum mechanics of atomic systems*. Odessa: Astroprint, **2008**.
- [2]. Köppel, H.; Domcke, W.; Cederbaum, L. S. Green's function method in quantum chemistry. *Adv. Chem. Phys.* **1984**, *57*, 59-132.
- [3]. Smith W. D., Chen T. T, Simons J., Theoretical studies of molecular ions. Vertical ionization potentials of hydrogen fluoride. *J. Chem. Phys.* **1974**, *61*, 2670-2674.
- [4]. Fedchuk, A. P.; Glushkov, A. V.; Lepikh, Ya. I.; Loboda, A. V.; Lopatkin, Yu. M.; Svina-renko, A. A. The Green's functions and density functional approach to vibrational structure in the photoelectron spectra of carbon

- oxide molecule. *Photoelectronics*. **2010**, *19*, 115-120.
- [5]. Glushkov, A. V.; Buyadzhi, V. V.; Kvasikova, A. S.; Ignatenko, A. V.; Kuznetsova, A. A.; Prepelitsa, G. P.; Ternovsky, V. B. Non-Linear Chaotic Dynamics of Quantum Systems: Molecules in an Electromagnetic Field and Laser Systems. In: *Quantum Systems in Physics, Chemistry, and Biology*; Springer: Cham, **2017**, *30*, 169-180.
- [6]. Glushkov, A. V. Quasiparticle approach in the density functional theory under finite temperatures and dynamics of effective Bose – condensate. *Ukr. Phys. Journ.* **1993**, *38*, 152-157.
- [7]. Glushkov, A. V. An universal quasiparticle energy functional in a density functional theory for relativistic atom. *Optics and Spectr.* **1989**, *66*, 31-36.
- [8]. Glushkov, A.; Malinovskaya, S.; Sukharev, D.; Khetselius, O.; Loboda, A.; Lovett, L. Green's function method in quantum chemistry: New numerical algorithm for the Dirac equation with complex energy and Fermi-model nuclear potential. *Int. J. Quant. Chem.* **2009**, *109*, 1717-1727.
- [9]. Glushkov, A. V.; Malinovskaya, S. V.; Gurnitskaya, E. P.; Khetselius, O. Yu.; Dubrovskaya Yu. V. Consistent quantum theory of recoil induced excitation and ionization in atoms during capture of neutron. *J. Phys. Conf. Ser.* **2006**, *35*, 425-430.
- [10]. Glushkov, A.; Loboda, A.; Gurnitskaya, E.; Svinarenko, A. QED theory of radiation emission and absorption lines for atoms in a strong laser field. *Phys. Scripta*. **2009**, *T135*, 014022.
- [11]. Glushkov, A. V.; Khetselius, O. Y.; Svinarenko, A. A. Relativistic theory of cooperative muon- γ -nuclear processes: Negative muon capture and metastable nucleus discharge. *Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics, Series: Progress in Theor. Chem. and Phys.*; Hoggan, P., Brändas, E., Maruani, J., Delgado-Barrio, G., Piecuch, P., Eds.; Springer: Cham, **2012**; Vol. 22, pp 51-68.
- [12]. Glushkov, A. V.; Malinovskaya, S. V. Cooperative laser nuclear processes: border lines effects. *New projects and new lines of research in nuclear physics*. Fazio, G., Hanappe, F., Eds.; World Scientific: Singapore, **2003**; pp 242-250.
- [13]. Glushkov, A.; Khetselius, O.; Svinarenko, A.; Buyadzhi, V. *Spectroscopy of autoionization states of heavy atoms and multiply charged ions*. Odessa: TEC, **2015**.
- [14]. Khetselius, O. Y. Relativistic Energy Approach to Cooperative Electron- γ -Nuclear Processes: NEET Effect. *Quantum Systems in Chemistry and Physics*; Springer: Dordrecht, **2012**; Vol. 26, pp 217-229.
- [15]. Khetselius, O. Yu. *Hyperfine structure of atomic spectra*. Astroprint: Odessa, **2008**.
- [16]. Khetselius, O. Yu. Relativistic perturbation theory calculation of the hyperfine structure parameters for some heavy-element isotopes. *Int. Journ. Quant. Chem.* **2009**, *109*, 3330-3335.
- [17]. Khetselius, O. Yu. Hyperfine structure of radium. *Photoelectronics*. **2005**, *14*, 83-85.
- [18]. Khetselius, O. Yu. Spectroscopy of cooperative electron-gamma-nuclear processes in heavy atoms: NEET effect. *J. Phys. Conf. Ser.* **2012**, *397*, 012012.
- [19]. Glushkov, A. V.; Malinovskaya, S. V.; Loboda, A. V.; Shpinareva, I. M.; Gurnitskaya, E. P.; Korchevsky, D. A. Diagnostics of the collisionally pumped plasma and search of the optimal plasma parameters of x-ray lasing: calculation of electron-collision strengths and rate coefficients for Ne-like plasma. *J. Phys.: Conf. Ser.* **2005**, *11*, 188-198.
- [20]. Khetselius, O. Yu. *Quantum structure of electroweak interaction in heavy finite Fermi-systems*. Astroprint: Odessa, **2011**.
- [21]. Glushkov, A. V.; Kondratenko, P. A.; Lepikh, Ya. I.; Fedchuk, A. P.; Svinarenko, A. A.; Lovett L. Electrodynamical and quantum - chemical approaches to modelling the electrochemical and catalytic processes on metals, metal alloys and semiconductors. *Int. J. Quant. Chem.* **2009**, *109*, 3473-3481.
- [22]. Glushkov, A. V.; Khetselius, O.; Gurnitskaya, E.; Loboda, A.; Sukharev, D. Relativistic quantum chemistry of heavy ions and hadronic atomic systems: spectra and ener-

- gy shifts. *AIP Conference Proc.* **2009**, 1102, 168-171.
- [23]. Florko, T. A., Loboda, A. V.; Svinarenko, A. A. Sensing forbidden transitions in spectra of some heavy atoms and multicharged ions: new theoretical scheme. *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.* **2009**, Issue 3, 10-15.
- [24]. Buyadzhi, V.; Glushkov, A.; Mansarliysky, V.; Ignatenko, A.; Svinarenko, A. Spectroscopy of atoms in a strong laser field: New method to sensing AC Stark effect, multiphoton resonances parameters and ionization cross-section. *Sensor Electr. and Microsyst. Techn.* **2015**, 12(4), 27-36.
- [25]. Khetselius, O. Optimized relativistic many-body perturbation theory calculation of wavelengths and oscillator strengths for li-like multicharged ions. *Adv. Quant. Chem.* (Elsevier). **2018**, 78, doi. org/10. 1016/bs. aiq. 2018. 06. 001.
- [26]. *The Fundamentals of Electron Density, Density Matrix and Density Functional Theory in Atoms, Molecules and the Solid State*; Gidopoulos, N. and Wilson, S. Eds.; Springer: Berlin, **2004**; Vol. 14.

Стаття надійшла до редакції 17.09.2018 р.

PACS 33.20.-t; UDC 539.186

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150505>

PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY OF DIATOMIC MOLECULES: HYBRID DENSITY FUNCTIONAL AND GREEN'S FUNCTIONS APPROACH TO SENSING MOLECULAR CONSTANTS

A. V. Ignatenko, A. V. Glushkov, O. Yu. Khetselius, Yu. Ya. Bunyakova, A. A. Svinarenko

Odessa State Environmental University, 15, Lvovskaya str., Odessa, 65016, Ukraine
E-mail: ignatenkoav13@gmail.com

Summary

The aim of the work is to develop and present a new effective approach to analysis and calculation of the photoelectron spectra of diatomic molecules, vibrational structure characteristics and at whole molecular spectral constants.

It is developed the optimized version of the hybrid combined density functional theory (DFT) and the Green's-functions (GF) approach to quantitative treating the diatomic photoelectron spectra and molecular constants. The Fermi-liquid quasiparticle version of the density functional theory is used. The density of states, which describe the vibrational structure in photoelectron spectra, is defined with the use of combined DFT-GF approach and is well approximated by using only the first order coupling constants in the optimized one-quasiparticle approximation.

Using the combined DFT-GF approach leads to significant simplification of the calculation and increasing an accuracy of theoretical prediction that is confirmed by computing the molecular spectral parameters for the molecules of CH, CO, HF etc.

Keywords: photoelectron spectra of molecules, new hybrid approach, Green's functions, density functional theory

**ФОТОЕЛЕКТРОННА СПЕКТРОСКОПІЯ ДВОАТОМНИХ МОЛЕКУЛ:
ГІБРИДНИЙ МЕТОД ФУНКЦІОНАЛУ ГУСТИНИ ТА ФУНКЦІЙ ГРІНА У
ВИЗНАЧЕННІ МОЛЕКУЛЯРНИХ КОНСТАНТ**

Г. В. Ігнатенко, О. В. Глушков, О. Ю. Хецеліус, Ю. Я. Бунякова, А. А. Свинаренко

Одеський державний екологічний університет, Львівська 15, 65016, Одеса

E-mail: ignatenkoav13@gmail.com

Реферат

Метою роботи є розробка та представлення нового ефективного підходу до аналізу та розрахунку фотоелектронних спектрів двоатомних молекул, характеристик коливальної структури спектру і в цілому молекулярних спектральних констант.

Розвинута оптимізована версія гібридної комбінованої теорії функціоналу густини (DFT) і методу функцій Гріна (ГФ) для кількісного опису фотоелектронних спектрів двоатомних молекул та молекулярних констант. Новий гібридний підхід суттєво базується на фермірідинній квазічастинній версії теорії функціоналу густини. Густина стану, яка описує коливальну структуру в фотоелектронних спектрах, визначається з використанням комбінованого DFT-GF підходу та фізично розумно апроксимується за допомогою тільки першого порядку констант зв'язку в оптимізованому одноквазічастинковому наближенні.

Використання комбінованого DFT-GF підходу призводить до значного спрощення молекулярних обчислень та збільшення точності теоретичного прогнозування, що повністю підтверджується відповідними обчисленнями спектральних параметрів для молекул CH, CO, HF тощо.

Ключові слова: фотоелектронний спектр молекул, новий гібридний підхід, метод функцій Гріна, теорія функціоналу густини

БІОСЕНСОРИ

BIOSENSORS

PACS 82.70.Uv УДК 53.085.5, 681.586

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150506>

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ КОМПЛЕКСІВ РУБРЕНУ ЗІ СТЕАРИНОВОЮ КИСЛОТОЮ І ПОЛІМЕТИЛМЕТАКРИЛАТОМ У ПРОГНОЗУВАННІ ЛЕНГМІЮРОГЕННОСТІ

Г. Б. Халед, К. М. Музика

Харківський національний університет радіоелектроніки, кафедра біомедичної інженерії,
лабораторія аналітичної оптохемотроніки,
61166, Україна, м. Харків, пр. Науки, 14
myzika_katya@ukr.net

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ КОМПЛЕКСІВ РУБРЕНУ ЗІ СТЕАРИНОВОЮ КИСЛОТОЮ І ПОЛІМЕТИЛМЕТАКРИЛАТОМ У ПРОГНОЗУВАННІ ЛЕНГМІЮРОГЕННОСТІ

Г. Б. Халед, К. М. Музика

Анотація. Представлено результати квантово-хімічних досліджень енергії взаємодії між молекулами рубрену і стеаринової кислотою, а також рубреном і поліметилметакрилатом (ПММА). Проведені дослідження показали, що комплекси рубрену з ПММА міцніші, ніж між рубреном і стеаринової кислотою. Це дає можливість з великою мірою ймовірності припустити, що ПММА буде кращим кандидатом-амфіфільною сполукою для створення плівок Ленгмюра-Блоджетт з рубреном, який є неамфіфільною молекулою.

Ключові слова: квантово-хімічний розрахунок, молекулярна система, рубрен, поліметилметакрилат, стеаринова кислота, амфіфільність

QUANTUM-CHEMICAL INVESTIGATIONS OF RUBRENE COMPLEXES WITH STEARIC ACID AND POLYMETHYLMETACRYLATE IN PREDICTION OF LANGMUIROGENICITY

G. B. Khaled, K. Muzyka

Abstract. The results of quantum chemical studies of the energy of interaction between the molecules of rubrene and stearic acid, as well as rubren and polymethyl methacrylate (PMMA) are presented. Studies have shown that rubrene complexes with PMMA are stronger than between rubren and stearic acid. This makes it possible to assume with a high degree of probability that PMMA will be the best candidate-amphiphilic compound for creating Langmuir-blodgett films with rubren, which is a non-amphiphilic molecule.

Keywords: quantum chemical calculation, molecular system, rubrene, polymethyl methacrylate, stearic acid, amphiphilicity

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ РУБРЕНА СО СТЕАРИНОВОЙ КИСЛОТОЙ И ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛЛАТОМ В ПРОГНОЗИРОВАНИИ ЛЕНГМЮРОГЕННОСТИ

Г. Б. Халед, Е. Н. Музыка

Аннотация. Представлены результаты квантово-химических исследований энергии взаимодействия между молекулами рубрена и стеариновой кислотой, а также рубреном и полиметилметакрилатом (ПММА). Проведенные исследования показали, что комплексы рубрена с ПММА более прочные, чем между рубреном и стеариновой кислотой. Это дает возможность с большой степенью вероятности предположить, что ПММА будет лучшим кандидатом-амфифильным соединением для создания пленок ленгмюра-блджетт с рубреном, который является неамфифильной молекулой.

Ключевые слова: квантово-химический расчет, молекулярная система, рубрен, полиметилметакрилат, стеариновая кислота, амфифильность

Вступ

Дослідження фізико-хімічних аспектів конструювання молекулярних систем є однією з важливих задач сенсорики. Одним з прикладів молекулярних систем, які використовуються при створенні сенсорних елементів є плівки Ленгмюра-Блджетт (ЛБ). Під ЛБ розуміють мономолекулярні шари поверхнево активних органічних речовин, що знаходяться на межі розділу рідкої (як правило, це вода) і газоподібної (повітря) фаз

[1]. Технологія ЛБ дозволяє отримати моно-і мультишарові високоорганізовані плівки з контрольованою товщиною, орієнтацією і високою поверхневою щільністю люмінесцентних центрів. Раціональний вибір матриці ЛБ для інкорпорування поліциклічних ароматичних вуглеводнів (ПАВ) є актуальною задачею при створенні твердофазних електрохемілюмінесцентних (ЕХЛ) сенсорів для визначення ПАВ [2].

Складність формування плівок ЛБ з неленгмюрогенними речовинами, до яких на-

лежать ПАВи є основною проблемою створення сенсора на ПАВ з використанням технології ЛБ. Це пояснюється тим, що рубрен не є амфифільною молекулою і не здатен самостійно утворювати однорідні і стабільні ЛБ-моношари на поверхні водної субфази і, таким чином, ЛБ-плівки [3]. Одним з підходів до вирішення такої проблеми є створення ЛБ-плівок змішаних бінарних систем на основі термодинамічно стабільних амфифільних мономерних або полімерних сполук з іммобілізованими в них неамфифільними молекулами. Для того, щоб краще зрозуміти природу молекулярних взаємодій у таких ЛБ-системах з неленгмюрогенними речовинами доцільно провести дослідження взаємодії модельних комплексів молекул ПАВ та амфифільних речовин (популярних у технології ЛБ). Значимо, що стеаринова кислота і поліметилметакрилат є представниками різних класів сполук з точки зору отримання змішаних бінарних систем з неамфифільними речовинами (зокрема, рубреном). Стеаринова кислота – ленгмюрогенна сполука, а ПММА – полімерна. Практичний інтерес до вивчення рубрену в цьому контексті пов'язаний з його неамфифільними властивостями, а значить, зі складністю утворювати однорідний і стабільний ЛБ-моношар. Крім того, рубрен має люмінесцентні властивості, що важливо при створенні твердофазних люмінесцентних сенсорів.

Використання методів комп'ютерної хімії вже показав свою ефективність у створенні сенсорів на основі молекулярно імпринтованих полімерів [4, 5]. Так, у [6] з використанням методу функціонала густини було обрано кращий кандидат-мономер (серед 13 доступних мономерів) для шаблону меламіну. Подібний підхід дав можливість спрогнозувати селективність молекулярної взаємодії обраного мономера з шаблонами, що належать до одного й того ж хімічного класу речовин [7]. Тому для раціонального вибору ЛБ матриці для неамфифільних ПАВ, теж доречно використовувати методи комп'ютерної хімії, зокрема, квантово-хімічні розрахунки.

Метою даної роботи є проведення квантово-хімічних досліджень для вивчення можливості рубрену утворювати комплекси складу 1:1 зі стеариновою кислотою і поліметилметакрилатом (ПММА). Дане дослідження дає можливість з великою ймовірністю припустити, яка з даних речовин є більш ефективною як ЛБ-матриця для інкорпорування рубрену.

Методика проведення розрахунків

Як відомо, ПММА – це лінійний полімер метилметакрилату, який має формулу $[-CH_2C(CH_3)(COOCH_3)-]_n$. Для побудови полімерів та їх розрахунку необхідно застосувати складні сучасні розрахункові методи при значних витратах розрахункового часу. Так як в роботі потрібно порівняти здатність рубрену до взаємодії зі стеариновою кислотою та з ПММА, раціонально було виділити частину молекули ПММА, співставну з молекулою стеаринової кислоти. Таким чином, в роботі ми використовували фрагмент ПММА, що має формулу $[-CH_2C(CH_3)(COOCH_3)-]_{16}$.

Початкове наближення до геометрії молекулярних комплексів рубрен-стеаринова кислота і рубрен-ПММА отримано за допомогою процедури молекулярного докінгу з використанням програми AutoDock Vina [8]. Для побудови двохкомпонентних комплексів на першому етапі проводився докінг рубрену і стеаринової кислоти, а також рубрену і ПММА, за результатами якого було відібрано 20 структур з найменшою загальною енергією.

З отриманих структур двохкомпонентних комплексів було відібрано 5 найбільш стабільних за енергією, для яких була проведена повна оптимізація і розраховані енергії взаємодії з використанням методу теорії функціонала електронної густини (DFT) (функціонал M06-2X) з базисним набором cc-pvdz (M06-2X / cc-pvdz) [9]. Відповідність геометрії комплексу мінімуму на поверхні потенційної енергії (ППЕ) підтверджено розрахунком других похідних енергії (гессіан), які мали тільки позитивні власні

значення. Енергії взаємодії між молекулами в комплексах було розраховано за допомогою методу M06-2X / cc-pvdz і скориговано на помилку суперпозиції базисного набору з використанням стандартної процедури Бойз-Бернарди (BSSE-корекція) [10]. Всі розрахунки виконувалися з використанням програми Gaussian03 [11].

Енергію взаємодії в комплексах рубрен-ленгмюрогенна речовина (1:1) розраховували за формулою (1):

$$E_{\text{int}} = E_{\text{CCE}} - (E_{\text{total of amphiphile}} + E_{\text{total of rubrene}}),$$

де E_{CCE} – повна енергія комплексу з врахуванням суперпозиційної помилки базисного набору (BSSE);

$E_{\text{total of amphiphile}}$ – повна енергія амфіфільної речовини;

$E_{\text{total of rubrene}}$ – повна енергія рубрена.

Результати та обговорення

Для того, щоб утворювати стабільні ленгмюрівські моношари на основі двокомпонентних комплексів, молекули, що входять до складу комплексу, повинні містити певні функціональні групи. Це дає можливість утворення специфічних міжмолекулярних взаємодій у цих комплексах, таких як водневі зв'язки, стекинг-взаємодії, галогенні зв'язки. Так, молекула стеаринової кислоти має гідроксильну і С-Н групи, які здатні утворювати водневі зв'язки в якості донора протона. Також ця молекула містить карбоксильну групу, яка може утворювати водневі зв'язки в якості акцептора протона. Молекула ПММА також містить С-Н групи, які здатні утворювати водневі зв'язки в якості донора протона і складнофірні групи, яка можуть утворювати водневі зв'язки в якості акцептора протона. Молекула рубрену має π -систему, яка може виступати в якості акцептора протона в міжмолекулярних взаємодіях. Таким чином, в комплексах рубрену зі стеаринової кислотою можливе утворення С-Н ... О, О-Н ... π і С-Н ... π водневих зв'язків. У комплексах рубрену з ПММА можливе утворення тільки С-Н ... О і С-Н ... π водневих зв'язків. Крім

того, досліджувані молекули є досить великими, тому в повну енергію взаємодії комплексу помітний внесок повинні вносити неспецифічні взаємодії, зокрема дисперсійні.

Проведення квантово-хімічного моделювання комплексів рубрену зі стеариновою кислотою і комплексів рубрену з ПММА за допомогою процедури молекулярного докінгу показало можливість утворення в них водневих зв'язків (Табл. 1).

Таблиця 1
Характеристики водневих зв'язків (Н...А, Å и D-Н...А, град) найбільш стійких комплексів рубрену зі стеариновою кислотою (1a-1e) і з ПММА (2a-2e) за даними метода M06-2X/cc-pvdz

Комплекс 1a ($E_{\text{int}} = -15.88$ kcal/mol)	Комплекс 2a ($E_{\text{int}} = -12.79$ kcal/mol)
О-Н... π 2.55 Å 124° С-Н... π 2.69 Å 151° С-Н... π 2.82 Å 130° С-Н... π 2.80 Å 122°	С-Н...О 2.56 Å 120° С-Н... π 2.73 Å 128° С-Н... π 2.62 Å 137° С-Н... π 2.78 Å 125°
Комплекс 1b ($E_{\text{int}} = -10.86$ kcal/mol)	Комплекс 2b ($E_{\text{int}} = -13.82$ kcal/mol)
О-Н... π 2.38 Å 134° С-Н... π 2.68 Å 158° С-Н... π 2.71 Å 177°	С-Н...О 2.24 Å 163° С-Н...О 2.41 Å 130° С-Н... π 2.45 Å 172° С-Н... π 2.42 Å 142°
Комплекс 1c ($E_{\text{int}} = -12.99$ kcal/mol)	Комплекс 2c ($E_{\text{int}} = -14.42$ kcal/mol)
С-Н... π 2.55 Å 133° С-Н... π 2.82 Å 133° С-Н... π 2.74 Å 153°	С-Н...О 2.32 Å 160° С-Н...О 2.22 Å 167° С-Н... π 2.47 Å 137° С-Н... π 2.78 Å 175°
Комплекс 1d ($E_{\text{int}} = -14.08$ kcal/mol)	Комплекс 2d ($E_{\text{int}} = -11.22$ kcal/mol)

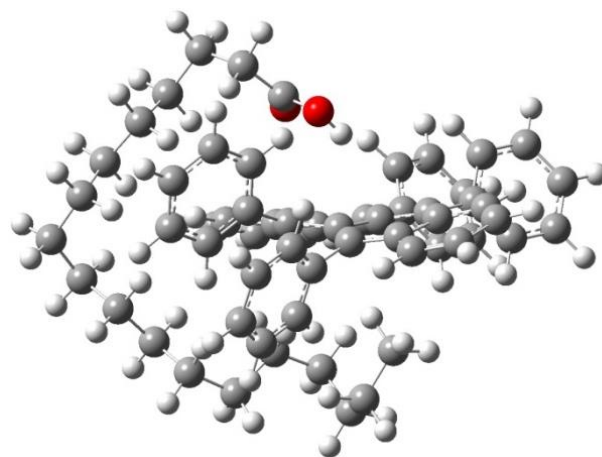
O-H... π 2.39 Å 159° C-H... π 2.77 Å 154° C-H... π 2.64 Å 147°	C-H...O 2.39 Å 128° C-H... π 2.76 Å 120° C-H... π 2.74 Å 135° C-H... π 2.67 Å 131°
Комплекс <i>1e</i> ($E_{\text{int}} = -18.11$ kcal/mol)	Комплекс <i>2e</i> ($E_{\text{int}} = -12.68$ kcal/mol)
O-H... π 2.50 Å 151° C-H... π 2.65 Å 144° C-H... π 2.68 Å 163°	C-H...O 2.51 Å 120° C-H... π 2.70 Å 141° C-H... π 2.79 Å 141°

На рис.1 показана структура найбільш стійких комплексів рубрену зі стеариновою кислотою і з ПММА та їх енергії взаємодії (E_{int}) за даними метода M06-2X/cc-pvdz. Варто зазначити, що кількість водневих зв'язків в комплексах рубрен з ПММА трохи більше, ніж в комплексах рубрен зі стеариновою кислотою. Можливо, це пов'язано з меншою кількістю функціональних груп, що беруть участь в комплексоутворенні кислоти.

Енергія взаємодії в 5 найбільш стабільних комплексах з ПММА знаходиться в діапазоні $-11.22 \div -14.42$ ккал / моль, який трохи менше, ніж було розраховано для комплексів рубрену зі стеариновою кислотою $-10.86 \div -18.11$ ккал / моль. Середня енергія взаємодії, розрахована за п'ятьма найбільш стабільними комплексами, становить 14.38 ккал / моль для комплексів зі стеариновою кислотою і 12.99 ккал / моль для комплексів з ПММА. Цей факт можна пояснити або значною стеричною напругою в молекулі ПММА, що знаходиться в зігнутій конформації, або значним внеском у загальну енергію взаємодії в комплексі енергії водневого зв'язку O-H ... π ..

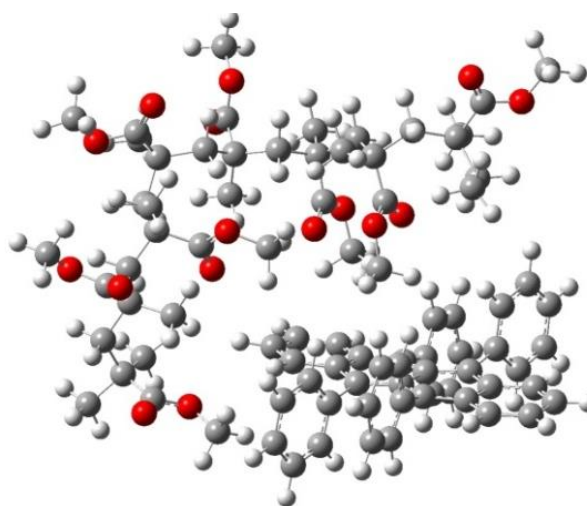
Відомо, що молекули стеаринової кислоти і ПММА є досить конформаційно гнучкими і, отже, можуть приймати різні просторові форми. В результаті проведення молекулярного докінгу було отримано вигнуті конформації стеаринової кислоти і ПММА. За даними Кембриджського банку структурних досліджень в рентгеноструктурному аналізі ці молекули мають all-trans конформацію. Для енергетичної оцінки цих конформацій ми провели розрахунок відносної стабільності

досліджуваних молекул квантово-хімічними методами.



$$E_{\text{int}} = -18.11 \text{ kcal/mol}$$

а



$$E_{\text{int}} = -12.68 \text{ kcal/mol}$$

б

Рисунок 1 - Структура найбільш стійких комплексів рубрену зі стеариновою кислотою і з ПММА: а) для комплексу *1e*; б) для *2e*.

Розрахунки показали, що all-trans конформація в молекулі стеаринової кислоти на 5.17 ккал / моль, а в молекулі ПММА на 14.07 ккал / моль більш вигідна, ніж вигнута (Рис.2). Результат цих розрахунків можна пояснити стеричною напругою в вигнутих

конформаціях, що підтверджується виникненням укорочених контактів (в стеаринової кислоти: укорочені контакти Н...Н 2.14 Å ÷ 2.31 Å, в ПММА: Н...Н 1.97 Å ÷ 2.30 Å, Н...О 2.39 Å ÷ 2.41 Å при сумі вандерваальсових радіусів Н...Н 2.34 Å, Н...О 2.46 Å).

Виходячи з того, що для молекули стеаринової кислоти і ПММА більш вигідною є

all-trans конформація, наступним етапом наших досліджень був розрахунок двокомпонентних комплексів рубрену з молекулами, що знаходяться в цій конформації. На рис.3 показано найбільш стійкі комплекси рубрену зі стеаринової кислотою (*1f-1i*) і с ПММА (*2f-2i*) у конформації all-trans, їх енергії взаємодії за даними метода M06-2X/cc-pvdz.

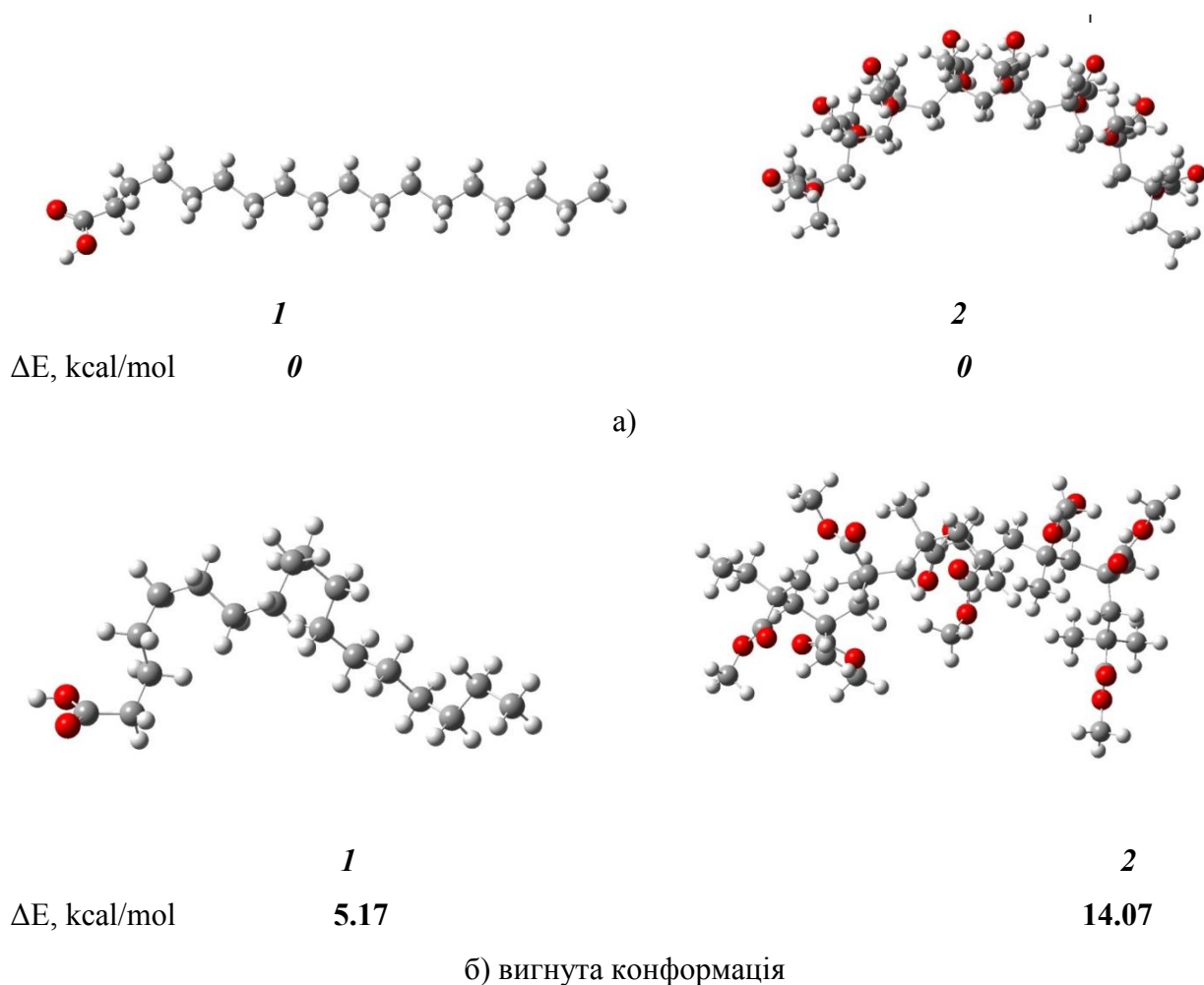


Рисунок 2 - Відносна стабільність конформацій в молекулах стеаринової кислоти (*1*) і ПММА (*2*): а) all-trans конформація; б) вигнута конформація.

Висновки

Результати квантово-хімічних розрахунків показали, що найбільшу енергію взаємодії мають комплекси 1f і 2g, в яких молекули пов'язані між собою С-Н ... О і С-Н ... π водневими зв'язками одночасно (Табл. 2) і мають найбільшу площу перекривання

серед оптимізованих комплексів. Зате найнижчу енергію взаємодії мають комплекси 1h і 2h. У комплексі 1h виявлено тільки С-Н ... О водневий зв'язок. А в комплексі рубрен-ПММА 2h виявлено С-Н ... О і С-Н ... π водневі зв'язки. Однак площа перекривання молекул, що взаємодіють в цих комплексах є мінімальною, що призводить до дуже ма-

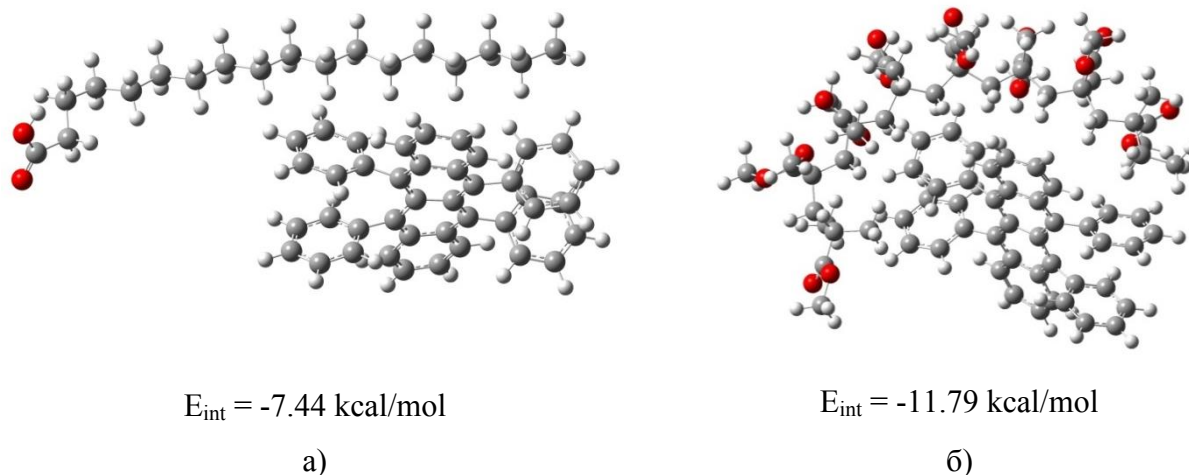


Рисунок 3 - Структура найбільш стійких комплексів рубрену зі стеаринової кислотою і з ПММА в конформації all-trans: а) для комплексу 1i; б) для 2i

ленького вкладу дисперсійної складової неспецифічних взаємодій (Табл. 2). Тому можна припустити, що повна енергія комплексів залежить як від енергії специфічних взаємодій, так і від енергій таких складових, як електростатичні і дисперсійні взаємодії між молекулами.

Таблиця 2

Характеристики водневих зв'язків (Н...А, Å и D-Н...А, град)) найбільш стійких комплексів рубрену зі стеаринової кислотою (1f-1i) і з ПММА (2f-2i) в конформації all-trans, їх енергії взаємодії (E_{int} , ккал/моль) за даними метода M06-2X/cc-pvdz.

Комплекс 1f ($E_{int} = -14.77 \text{ kcal/mol}$)	Комплекс 2f ($E_{int} = -11.82 \text{ kcal/mol}$)
C-H...O 2.59 Å 125° C-H...π 2.68 Å 167° C-H...π 2.77 Å 169°	C-H...O 2.53 Å 121° C-H...π 2.78 Å 127° C-H...π 2.73 Å 163° C-H...π 2.85 Å 131°
Комплекс 1g ($E_{int} = -5.32 \text{ kcal/mol}$)	Комплекс 2g ($E_{int} = -12.61 \text{ kcal/mol}$)
C-H...O 2.40 Å 117° C-H...π 2.84 Å 114°	C-H...O 2.37 Å 165° C-H...O 2.33 Å 166° C-H...π 2.73 Å 130° C-H...π 2.59 Å 132°
Комплекс 1h ($E_{int} = -2.00 \text{ kcal/mol}$)	Комплекс 2h ($E_{int} = -5.88 \text{ kcal/mol}$)

C-H...O 2.38 Å 127°	C-H...O 2.37 Å 145° C-H...O 2.44 Å 122° C-H...π 2.83 Å 154°
Комплекс 1i ($E_{int} = -7.44 \text{ kcal/mol}$)	Комплекс 2i ($E_{int} = -11.79 \text{ kcal/mol}$)
C-H...π 2.72 Å 145° C-H...π 2.73 Å 142°	C-H...O 2.50 Å 125° C-H...π 2.78 Å 173° C-H...π 2.87 Å 166° C-H...π 2.77 Å 133°

Список використаної літератури

- [1]. G. J. Ashwell. Langmuir-Blodgett films: Molecular engineering of non-centrosymmetric structures for second-order nonlinear optical applications // Journal of Materials Chemistry. 9(9), pp. 1991-2003 (1999).
- [2]. Г. Б. Халед, А. В. Кукоба, О. М. Білаш, Ю. Т. Жолудов, Д. В. Сніжко, К. М. Музика. Електрохемілюмінесцентна платформа для твердофазного визначення слідових концентрацій поліциклічних ароматичних вуглеводнів // Радіотехніка: Всеукр. між-від. наук.-техн. зб. 192, с. 106-112 (2018).
- [3]. Y. Zholudov, D. Snizhko, A. Kukoba, H. Bilash, M. Rozhitskii. Aqueous electrochemiluminescence of polycyclic aromatic hydrocarbons immobilized into Langmuir-Blodgett film at the electrode // Electrochimica Acta, 54 (2), pp. 360-363 (2008).
- [4]. I. A. Nicholls, K. Adbo et al. Can we rationally design molecularly imprinted poly-

mers // *Analytica Chimica Acta*. 435 (1), pp. 9-18 (2001).

[5]. К. М. Музыка, S. Piletsky, M. Rozhitskii. Chapter. 5 MIP-based Voltammetric Sensors. in *Molecularly Imprinted Polymers: A Handbook for Academia and Industry*, Alvarez-Lorenzo C.; iSmithers, UK, pp. 197-228 (2013). (Chapter).

[6]. К. Музыка. Метод теорії функціонала густини у дослідженні псевдо-іммунологічної специфічності штучного рецептора на меламін // *Східно-європейський журнал перетових технологій*. № 5(6), С. 22-26 (2014).

[7]. К. Музыка. Обчислювальний експеримент в обґрунтуванні вибору функціонального мономеру для синтезу «штучного рецептора» на меламін // *Сенсорна електроніка та мікросистемні технології*. Т. 11(1), с. 33-41 (2014).

[8]. O. Trott, A. J. Olson. AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading // *Comput. Chem.* 31, pp. 455-461 (2010).

[9]. E. G. Hohenstein. Assessment of the performance of the M05-2X and M06-2X exchange-correlation functionals for noncovalent interactions in biomolecules // *Journal of Chemical Theory and Computation*. 4(12). pp. 1996-2000 (2008).

[10]. S. F. Boys, F. Bernardi. The calculation of small molecular interactions by the differences of separate total energies. Some procedures with reduced errors *Mol. Phys.*, 19, pp. 553-566 (1970)

[11]. M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, *Gaussian 09, Revision A. 01*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

Стаття надійшла до редакції 16.10.2018 р.

PACS 82.70.Uv UDC 53.085.5, 681.586
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150506>

QUANTUM-CHEMICAL INVESTIGATIONS OF RUBRENE COMPLEXES WITH STEARIC ACID AND POLYMETHYLMETACRYLATE IN PREDICTION OF LANGMUIROGENICITY

G. B. Khaled, K. Muzyka

Kharkiv National University of Radio Electronics, Department of Biomedical Engineering,
Laboratory of Analytical Optochemotronics, 61166, Ukraine, Kharkiv, Nauki Ave, 14

Summary

The aim of the work is to conduct quantum chemical investigations of the possibility of rubrene to form 1:1 complexes with stearic acid and polymethylmethacrylate (PMMA), in order to assume

with high probability, which of these substances are more effective as a Langmuir-Blodgett matrix for incorporating of rubrene. Full optimization and calculation of the interaction energies between the molecules in the complexes were carried out using density functional theory (M06-2X/cc-pvdz) in Gaussian 03 program. The correspondence of the geometry of the complex to the minimum on a potential energy surface is confirmed by the calculation of the second energy derivatives, which had only positive eigenvalues. Full optimization and the interaction energies between the molecules in the complexes were calculated using the density functional theory (M06-2X / cc-pvdz) in Gaussian 03 program. The correspondence of the complex geometry to the minimum on the potential energy surface is confirmed by the calculation of the second energy derivatives, which had only positive eigenvalues. The results of the calculations showed that the highest interaction energy has complexes in which the molecules are simultaneously interconnected between themselves via C-H ... O and C-H ... π , hydrogen bonds and have the largest overlap area among the optimized complexes. It can be summarized that complexes of rubrene with PMMA are stronger than between rubrene and stearic acid. Thus, it possible to assume with a high level of probability that PMMA will be more suitable amphiphilic molecule for creating Langmuir-Blodgett films with rubrene, which is a non-amphiphilic molecule.

Keywords: quantum chemical calculation, molecular system, rubrene, polymethylmethacrylate, stearic acid, amphiphilicity

PACS 82.70.Uv УДК 53.085.5, 681.586
DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150506>

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ КОМПЛЕКСІВ РУБРЕНУ ЗІ СТЕАРИНОВОЮ КИСЛОТОЮ І ПОЛІМЕТИЛМЕТАКРИЛАТОМ У ПРОГНОЗУВАННІ ЛЕНГМЮРОГЕННОСТІ

Г. Б. Халед, К. М. Музика

Харківський національний університет радіоелектроніки, кафедра біомедичної інженерії,
лабораторія аналітичної оптикоелектроніки, 61166, Україна, м. Харків, пр. Науки, 14

Реферат

Метою роботи є проведення квантово-хімічних досліджень для вивчення можливості рубрену утворювати комплекси складу 1:1 зі стеариновою кислотою і поліметилметакрилатом (ПММА). Дане дослідження дозволяє з великою ймовірністю припустити, яка з даних речовин є більш ефективною в якості матриці ленгмюра-блоджетт для інкорпорування рубрену. Повна оптимізація і розрахунок енергій взаємодії між молекулами в комплексах проводилися з використанням методу теорії функціонала густини (M06-2X / cc-pvdz) в програмі Gaussian 03. Відповідність геометрії комплексу мінімуму на поверхні потенційної енергії підтверджено розрахунком других похідних енергії, які мали тільки позитивні власні значення. Результати розрахунків показали, що найбільшу енергію взаємодії мають комплекси, в яких молекули пов'язані між собою C-H ... O і C-H ... π водневими зв'язками одночасно і мають найбільшу площу перекривання серед оптимізованих комплексів. Проведені дослід-

дження продемонстрували, що комплекси рубрену з ПММА міцніші, ніж між рубреном і стеаринової кислотою. Це дає можливість з великою мірою ймовірності припустити, що ПММА буде більш придатною амфифільною молекулою для створення плівок Ленгмюра-Блоджетт з рубреном, який є неамфифільною молекулою.

Ключові слова: квантово-хімічний розрахунок, молекулярна система, рубрен, поліметилметакрилат, стеаринова кислота, амфифільність

МАТЕРІАЛИ ДЛЯ СЕНСОРІВ

SENSOR MATERIALS

УДК 621.315.592

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150507>

СТРУКТУРНО-ФАЗОВІ ПЕРЕТВОРЕННЯ І ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ НА БАЗІ СИСТЕМИ “ $\text{SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3\text{-ZnO-BaO}$ ”

Я. І. Лепіх, Т. І. Лавренова, Н. М. Садова, В. А. Борщак, А. П. Балабан, Н. П. Затовська

Міжвідомчий науково-навчальний фізико-технічний центр МОН і НАН України при
Одеському національному університеті імені І. І. Мечникова,
e-mail: ndl_lepikh@onu.edu.ua

СТРУКТУРНО-ФАЗОВІ ПЕРЕТВОРЕННЯ І ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ НА БАЗІ СИСТЕМИ “ $\text{SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3\text{-ZnO-BaO}$ ”

Я. І. Лепіх, Т. І. Лавренова, Н. М. Садова, В. А. Борщак, А. П. Балабан, Н. П. Затовська

Анотація. Досліджено процеси склоутворення, кристалізації, а також вивчені фізико - хімічні властивості системи “ $\text{SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3\text{-ZnO-BaO}$ ” при різних співвідношеннях концентрацій вихідних компонентів і легуючих домішок, від їх гранулометричного складу з метою вибору оптимальних складів стекол для резистивних, провідникових і діелектричних шарів товстоплівкових елементів гібридних інтегральних схем, сонячних батарей, мікроелектронних сенсорів та ін. Розроблено легкоплавке скло для товстоплівкових наноконструктивів, яке не містить токсичних сполук свинцю. У якості основного склоутворюючого компоненту обрано оксид вісмуту, який надає можливість отримувати більш легкоплавкі стекла.

Ключові слова: наноконструктиви, легкоплавкі стекла, гібридні інтегральні схеми, сенсори

**STRUCTURAL-PHASE TRANSFORMATIONS AND ELECTROPHYSICAL
PROPERTIES OF THE COMPOSITE MATERIALS BASED ON
"SiO₂-B₂O₃-Bi₂O₃-ZnO-BaO" SYSTEM**

Ya. I. Lepikh, T. I. Lavrenova, N. M. Sadova, V. A. Borschak, A. P. Balaban, N. P. Zatovskaya

Abstract: The processes of the glass forming and crystallization and also physical and chemical properties of "SiO₂ - B₂O₃ - Bi₂O₃ - ZnO - BaO" system with the different concentration ratios of the initial components and doping impurities, on their granulometric composition in order to choose the optimal composition of the glasses for resistive, conductive and dielectric layers of thick-film elements of hybrid integrated circuits, solar cells, microelectronic sensors, and others has been investigated. The low-melting glass for thick-film nanocomposites, which does not contain toxic compounds of lead, is developed. As the main glass-forming component, bismuth oxide is chosen, which gives the possibility of obtaining more fusible glasses.

Keywords: nanocomposites, fusible glasses, hybrid integrated circuits, sensors

**СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА БАЗЕ СИСТЕМЫ
"SiO₂-B₂O₃-Bi₂O₃-ZnO-BaO"**

Я. И. Лепих, Т. И. Лавренова, Н. М. Садовая, В. А. Борщак, А. П. Балабан, Н. П. Затовская

Аннотация. Исследованы процессы стеклообразования, кристаллизации, а также изучены физико - химические свойства системы "SiO₂-B₂O₃-Bi₂O₃-ZnO-BaO" при различных соотношениях концентраций исходных компонентов и легирующих примесей, от их granulometric состава с целью выбора оптимальных составов стекол для резистивных, проводящих и диэлектрических слоев толстоленочных элементов гибридных интегральных схем, солнечных батарей, микроэлектронных сенсоров и др. Разработано легкоплавкое стекло для толстоленочных нанокomпозитов, не содержащее токсичных соединений свинца. В качестве основного стеклообразующего компонента избран оксид висмута, который дает возможность получать более легкоплавкие стекла.

Ключевые слова: нанокomпозиты, легкоплавкие стекла, гибридные интегральные схемы, сенсоры

1. ВСТУП. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Нанодисперсні композити на базі “скло – сполуки металів”, широко використовуються в мікроелектроніці, зокрема, у якості наноконпозиційних товстоплівкових елементів багаторівневих гібридних інтегральних схем (ГІС) та сенсорних елементів. Наноконпозиційні елементи формуються шляхом відпалу резистивних паст, які є конпозиційною сумішшю порошків функціонального матеріалу, стеклозв’язки, органічної зв’язки. В процесі відпалювання паст порошки скла оплавляються і спікаються в скляну матрицю, в якій фіксуються частки функціональної фази, утворюючи струмопровідні ланцюги. Тому комплекс електрофізичних властивостей наноконпозиційних елементів значною мірою зумовлений властивостями і складом скляного зв’язуючого.

Таким чином актуальною задачею є дослідження процесів склоутворення, кристалізації, а також вивчення фізико - хімічних властивостей системи “ $\text{SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3\text{-ZnO-BaO}$ ” при різних співвідношеннях концентрацій вихідних компонентів і легуючих домішок з метою вибору оптимальних складів стекол для резистивних, провідникових і діелектричних шарів товстоплівкових елементів ГІС, сонячних батарей, мікроелектронних сенсорів і ін. [1-4].

2. МЕТОДИ І МАТЕРІАЛИ

На підставі вивчення процесів склоутворення, фізико-хімічних властивостей (ТКЛР, температура початку розм’якшення $T_{пр}$, питомий поверхневий опір ρ , хімічна стійкість) було вибрано оптимальні склади стекол для товстоплівкових елементів інтегральних мікросхем і сенсорів.

Фізико-хімічні властивості стекол наведено в табл. 1.

Таблиця 1.

Фізико-хімічні властивості стекол.

Температура варки, °С	$T_{пр}$, °С	ТКЛР ($L_{20-300} \times 10^{-7}$ град ⁻¹)	ρ при 20°С, Ом×см ²	Кристалізаційні властивості, (300 ... 900)°С
900...1000	400 ...450	60 ... 80	10^{14} - 5×10^{14}	не кристалізуються

Отримані стекла мають високу водостійкість (II гідролітичний клас). Перевагами скла також є: зменшення температури початку розм’якшення (400–450° С); збільшення питомого поверхневого опору в десять разів (10^{14} - 5×10^{14} Ом×см²), відсутність токсичних сполук свинцю. Стекла можуть бути використані при отриманні наноконполитів для роботи у високовольтній апаратурі з напругою (10 - 25) кВ, а також у якості скляного зв’язуючого товстоплівкових наноконпозиційних елементів для діелектричних шарів багаторівневих ГІС і сенсорів.

Значну роль у забезпеченні відтворення і стабільності електрофізичних і механічних параметрів товстих плівок має дисперсність порошків функціонального матеріалу і склофрітти, застосовуваних при виготовленні паст. Хоча у існуючих на теперішній час вимогах дисперсність порошків для товстоплівкових паст не регламентована для паст придатні порошки з розмірами частинок менше 25 мкм. Тому було досліджено вплив на електрофізичні властивості паст розмірів, форм і дисперсності частинок порошків, застосовуваних при їх виготовленні.

Для досліджень використовувались: система аналізу зображень «QUANTIMET - 720» і растровий електронний мікроскоп (РЕМ), рентгенівський мікроскоп, що просвічує (ПЕМ).

3. РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ І ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

На рис.1 для порівняння наведено гістограми розподілу за розмірами частинок різних порошків скла. Аналіз гістограм до-

звояє зробити такі висновки: кращою дисперсністю характеризуються порошки скла марки 2006-8, площа проекції їх частинок складає переважно від долів до 8...11 мкм². Порошки скла марки 279-2 характеризуються великим розкидом розмірів частинок, що негативно позначається на відтворенні електрофізичних параметрів товстоплівкових нанокомпозитів.

Спектрограми розподілу по поверхні спеченої пасти провідної фази рутенія, які зняті за допомогою рентгенівського мікроаналізатора у випромінюванні Ru_{La} , показують, що функціональний матеріал у нанокомпозитах, виготовлених з паст на базі скла марки 2006-8 - RuO_2 розподілений більш рівномірно, ніж у плівках на основі паст на базі «скло марки 279-2 - RuO_2 » (рис. 2.а, 2.б).

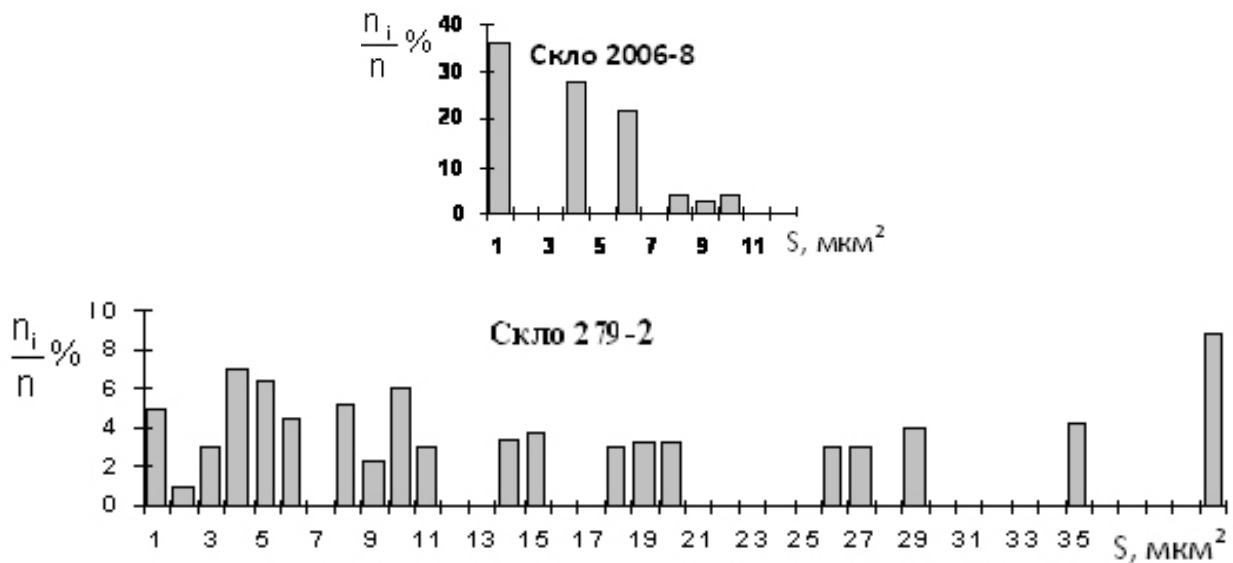
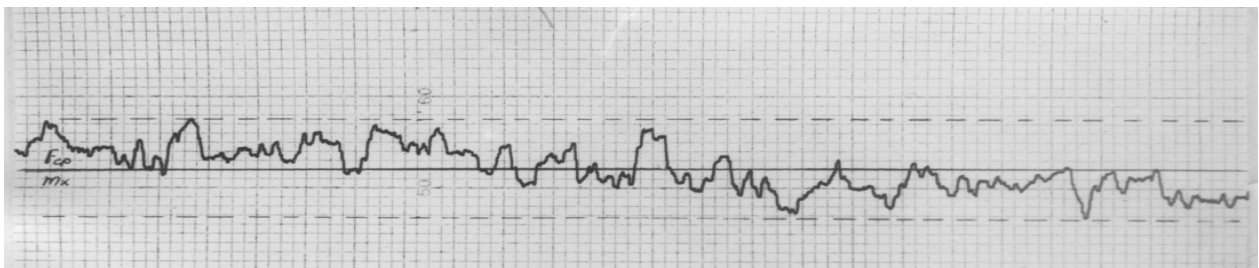
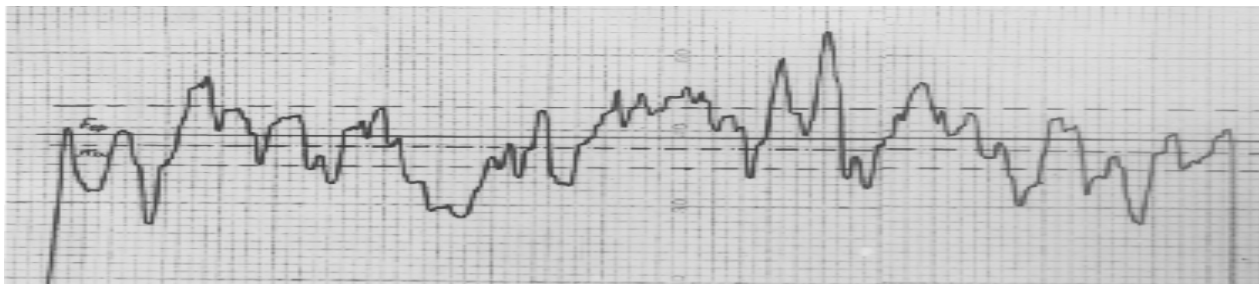


Рис. 1. Гістограми розподілу за розмірами частинок порошків стекол марок 2006-8 і 279-2.



а)

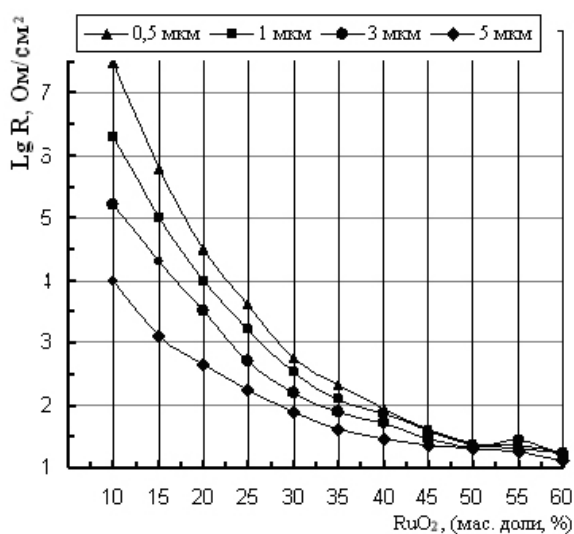


б)

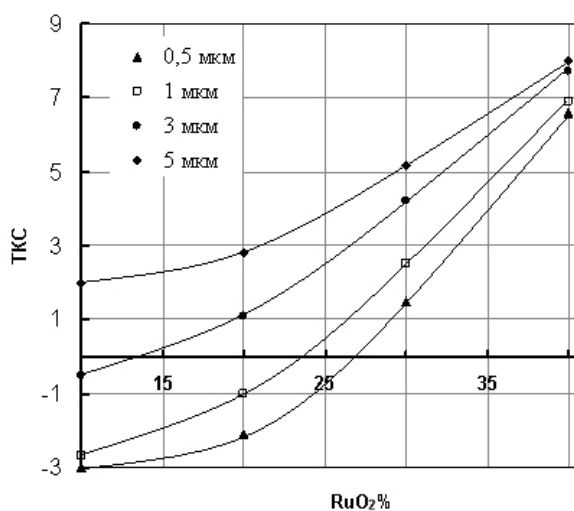
Рис. 2. Спектрограми розподілу по поверхні спеченої пасти провідної фази рутенію, зняті за допомогою рентгенівського мікроаналізатора у випромінюванні Ru_{La} .

Як показали дослідження, великий розкид розмірів частинок порошоків вихідних компонентів паст є одним з істотних чинників, що впливають на відтворення електрофізичних параметрів і надійність товстоплівкових наноконкомпозитів.

Тому в роботі досліджено спільний вплив геометричних розмірів частинок скла та співвідношення концентрацій вихідних компонентів на електрофізичні параметри системи на базі «скло - RuO_2 » (рис. 3).



а)



б)

Рис. 3. Залежність $\text{Lg}R$ ($\text{Ом}/\text{см}^2$) - а) від геометричних розмірів частинок скла і співвідношення концентрацій «скло - RuO_2 » при фіксованій температурі відпалювання 870°C . Розмір частинок RuO_2 – 0,5 мкм. б) ТКС ($10^{-4} \times \text{град}^{-1}$);

Встановлено, що із збільшенням відношення струмопровідна фаза – постійне зв'язуюче в пастах поверхневий питомий опір плівок знижується, а температурний коефіцієнт опору переходить з області «-» в область «+» значень. Таким чином, досліджені шари описуються класичною залежністю властивостей від складу для товстоплівкових резистивних матеріалів. Вона обумовлена зменшенням товщини діелектричних прошарків між частинками струмопровідної фази і розгалуженням їх кластерних ланцюжків при зменшенні об'ємної частки скла.

Найбільший вплив розмірів частинок склофрити на питомий опір плівок має місце у зразків з низьким вмістом двоокису рутенію. Опір плівок росте із збільшенням вмісту скла, найбільш висока швидкість росту питомого опору має місце для склофрити з розміром частинок 0,5 мкм. При зростанні концентрації RuO_2 питомий опір наближається до постійного значення і не залежить від розмірів частинок скла.

Залежність питомого опору від розмірів частинок для високоомних плівок можна пов'язати з процесами їх спікання і впливом дисперсності компонентів на геометричні розміри струмоведучих ланцюжків. Із зменшенням розмірів частинок скла збільшується довжина і зменшується площа поперечного перетину ланцюжків провідної фази. В системах « RuO_2 – скло» спостерігається змішаний характер провідності як комбінація процесів, які відбуваються в струмопровідній фазі і скляній матриці. В плівках з високим питомим опором основний внесок в провідність вносить склофрита, отже, стан цієї фази відіграє суттєву роль в процесі струмопереносу.

4. ВИСНОВКИ

В результаті проведених досліджень розроблено легкоплавке скло для товстоплівкових наноконкомпозитів, яке не містить токсичних сполук свинцю. Зроблено висновок, що у якості основного склаутворюючого компоненту доцільно обрати оксид вісмуту, який

надає можливість отримувати більш легкоплавкі стекла. Легуючі домішки (SiO_2 , CdO , ZnO , MgO , B_2O_3) підібрані таким чином, щоб забезпечити необхідні фізико-технічні характеристики. Перевагами скла є: зменшення температури початку розм'якшення ($400 - 450^\circ \text{C}$); збільшення питомого поверхневого опору в десять разів ($10^{14} - 5 \times 10^{14} \text{ Ом} \times \text{см}$) [4].

Отримані залежності електрофізичних властивостей товстоплівкових нанокompозитів від фазового і гранулометричного складу скляного зв'язуючого, при різних співвідношеннях концентрацій струмопровідних компонентів і легуючих домішок, від їх гранулометричного складу надає можливість використання товстоплівкових елементів у якості сенсорів температури і варіювання їх ЕФП параметрами.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

[1]. Lepikh Ya. I., Lavrenova T. I., Sadova N. N. Physical properties of nanocomposite

elements based on Ni // Materials of the XVI international conference on physics and technology of thin films and nanosystems (ICPTTFN-XVI) May 15-20, 2017, Ivano-Frankivsk, Ukraine, P. 232.

[2]. Лепіх Я. І., Лавренова Т. І. Комплексний склад для відновлення і захисту розплаву низькотемпературного припою від окислення і випаровування. Патент на корисну модель № UA 116128 U від 10. 05. 2017. Бюл. № 9/2017 від 10.05.2017.

[3]. Лепіх Я. І., Лавренова Т. І. . Садова Н. М. Склоподібні матеріали для нанокompозитів на базі системи "скло-оксиди металів" // Сб. научных трудов IX Международной научн. конф. «Функциональная база нанoeлектроники». 18-23 сентября 2017, Харьков-Одесса. - С. 33-35.

[4]. Лепіх Я. І., Лавренова Т. І. Легкоплавке скло для нанокompозитів. Патент на винахід №113565 від 10. 02. 2017.

Стаття надійшла до редакції 23.10.2018 р.

UDC 621.315.592

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150507>

STRUCTURAL-PHASE TRANSFORMATIONS AND ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF THE COMPOSITE MATERIALS BASED ON "SiO₂-B₂O₃-Bi₂O₃-ZnO-BaO" SYSTEM

Ya. I. Lepikh, T. I. Lavrenova, N. M. Sadova, V. A. Borschak, A. P. Balaban, N. P. Zatovskaya

Interdepartmental scientific-educational physics and technical centre of MES and NAS of Ukraine at Odessa I. I. Mechnikov National University, e-mail: ndl_lepikh@onu.edu.ua

Summary

The processes of the glass forming and crystallization and also physical and chemical properties of „SiO₂ - B₂O₃ - Bi₂O₃ - ZnO - BaO” system with the different concentration ratios of the initial components and doping impurities, on their granulometric composition in order to choose the optimal composition of the glasses for resistive, conductive and dielectric layers of thick-film elements of hybrid integrated circuits, solar cells, microelectronic sensors, and others has been investigated.

The low-melting glass for thick-film nanocomposites, which does not contain toxic compounds of lead, is developed. As the main glass-forming component, bismuth oxide is chosen, which gives the possibility of obtaining more fusible glasses.

Low-melting glass for thick-film nanocomposites, which does not contain toxic compounds of lead, has been developed. As the main glass-forming component, bismuth oxide is chosen, which gives the possibility of obtaining more fusible glasses. Doping impurities (SiO_2 , CdO , ZnO , MgO , B_2O_3) are selected in such way as to provide the necessary physical and technical characteristics. The glass advantages are: decrease in the temperature of the softening beginning (400 - 450°C); increase of the specific surface resistance ten times (10^{14} - $5 \cdot 10^{14}$ Ohm·cm) [4].

The dependences of electrophysical properties of thick-film nanocomposites on the glass binding agent composition phase and granulometric at different concentration ratios of conductive components and doping impurities on their granulometric composition has been obtained. They indicate the possibility of using thick-film elements as temperature sensors.

Keywords: nanocomposites, fusible glasses, hybrid integrated circuits, sensors

УДК 621.315.592

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150507>

СТРУКТУРНО-ФАЗОВІ ПЕРЕТВОРЕННЯ І ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ НА БАЗІ СИСТЕМИ “ SiO_2 - B_2O_3 - Bi_2O_3 - ZnO - BaO ”

Я. І. Леніх, Т. І. Лавренова, Н. М. Садова, В. А. Борщак, А. П. Балабан, Н. П. Затовська

Міжвідомчий науково-навчальний фізико-технічний центр МОН і НАН України при
Одеському національному університеті імені І. І. Мечникова,
e-mail: ndl_lepikh@onu.edu.ua

Реферат

Розроблено легкоплавке скло для товстоплівкових наноконкомпозитів, яке не містить токсичних сполук свинцю. У якості основного склаутворюючого компоненту обрано оксид вісмуту, який надає можливість отримувати більш легкоплавкі стекла. Легуючі домішки (SiO_2 , CdO , ZnO , MgO , B_2O_3) підібрані таким чином, щоб забезпечити необхідні фізико-технічні характеристики. Перевагами скла є: зменшення температури початку розм'якшення (400 – 450°C); збільшення питомого поверхневого опору в десять разів (10^{14} - 5×10^{14} Ом·см) [4].

Отримані залежності електрофізичних властивостей товстоплівкових наноконкомпозитів від фазового і гранулометричного складу скляного зв'язуючого, при різних співвідношеннях концентрацій струмопровідних компонентів і легуючих домішок, від їх гранулометричного складу надає можливість використання товстоплівкових елементів у якості сенсорів температури і варіювання їх ЕФП параметрами.

Досліджено процеси склаутворення, кристалізації, а також вивчені фізико - хімічні властивості системи “ SiO_2 - B_2O_3 - Bi_2O_3 - ZnO - BaO ” при різних співвідношеннях концентрацій вихідних компонентів і легуючих домішок, від їх гранулометричного складу з метою вибору

оптимальних складів стекол для резистивних, провідникових і діелектричних шарів товстоплівкових елементів гібридних інтегральних схем, сонячних батарей, мікроелектронних сенсорів та ін. Розроблено легкоплавке скло для товстоплівкових нанокompозитів, яке не містить токсичних сполук свинцю. У якості основного склоутворюючого компоненту обрано оксид вісмуту, який надає можливість отримувати більш легкоплавкі стекла.

Ключові слова: нанокompозити, легкоплавкі стекла, гібридні інтегральні схеми, сенсори

МАТЕРІАЛИ ДЛЯ СЕНСОРІВ

SENSOR MATERIALS

УДК 538.956

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150514>

ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ ПОЛІМЕРНОГО КОМПОЗИТУ PP-VO₂

В. Р. Колбунов, О. В. Вашерук

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
e-mail: kolbunov_vadim@i.ua, vasheruk@ukr.net

ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ ПОЛІМЕРНОГО КОМПОЗИТУ PP-VO₂

В. Р. Колбунов, О. В. Вашерук

Анотація. В роботі представлені результати дослідження електропровідності при постійному струмі зразків полімерного композиту поліпропілен-діоксид ванадію з об'ємною часткою VO₂ від 0,1 до 0,7. Показано, що електропровідність композитів носить перколяційний характер. Перколяційний перехід знаходиться в області 0,3-0,35 об'ємних часток діоксиду ванадію. Вольт-амперні характеристики зразків композиту із вмістом VO₂ більше 0,35 мають S-подібну форму. У залежності електричного опору зразків композитів від температури виявлено стрибкоподібне зменшення опору в області температури фазового переходу напівпровідник-метал в VO₂. Особливості електропровідності полімерних композитів PP-VO₂, що виявлені у цій роботі, дозволяють робити висновки про можливість створення на їх основі критичних терморезистивних елементів.

Ключові слова: полімерний композит, VO₂, електропровідність, температурна залежність опору, ВАХ

ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF POLYMER COMPOSITE PP-VO₂

V. R. Kolbunov, O. V. Vasheruk

Abstract. The work presents the results of the study of the electrical conductivity of the direct current samples of a polymer composite polypropylene-vanadium dioxide with a volume fraction of VO₂ from 0.1 to 0.7. It is shown that the conductivity of composites has a percolation character. The percolation transition is in the range of 0.3-0.35 volumetric particles of vanadium dioxide. The volt-current characteristics of samples of a composite with a content of VO₂ of more than 0.35 have an S-shaped shape. In the temperature dependence of the electrical resistance of the samples of composites, a jump-like decrease in resistance was found in the region of the temperature of the phase transition of the semiconductor-metal in VO₂. Features in the behavior of electrical conductivity of polymer composites PP-VO₂, discovered in this work, allow us to talk about the possibility of creating on their basis critical thermoresistive elements.

Keywords: polymer composite, VO₂, electrical conductivity, temperature dependence of resistance, VCC

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ПОЛИМЕРНОГО КОМПОЗИТА PP-VO₂

В. Р. Колбунов, А. В. Вашерук

Аннотация. В работе представлены результаты исследования электропроводности на постоянном токе образцов полимерного композита полипропилен–диоксид ванадия с объемной долей VO₂ от 0,1 до 0,7. Показано, что электропроводность композитов носит перколяционный характер. Перколяционный переход находится в области 0.3-0,35 объемных долей диоксида ванадия. Вольт-амперные характеристики образцов композита с содержанием VO₂ более 0,35 имеют S-образную форму. В температурной зависимости электрического сопротивления образцов композитов обнаружено скачкообразное уменьшение сопротивления в области температуры фазового перехода полупроводник-металл в VO₂. Обнаруженные особенности в поведении электропроводности полимерных композитов PP-VO₂ позволяют говорить о возможности создания на их основе критических терморезистивных элементов.

Ключевые слова: полимерный композит, VO₂, электропроводность, температурная зависимость сопротивления, ВАХ

1. Вступ

Розробка стабільних об'ємних критичних терморезисторів на основі компонента з фазовим переходом метал-напівпровідник (ФПМН) важлива для ряду галузей електроніки та електротехніки, де плівкові структури не можуть бути використані через порівняно малі робочі струми [1, 2]. Невирішеною до теперішнього часу проблемою технології терморезисторів, яка стримує їх виробництво і використання, є нестабільність параметрів матеріалу. Ця нестабільність пов'язана зі зміною лінійних розмірів зразка через перебудову кристалічної решітки при ФПМН [3, 4].

Одним з напрямків подолання цього недоліку є розробка на основі полікристалічних порошків VO_2 полімерних композитів, де в якості матричних матеріалів використовується епоксидна смола [5], поліетилен [6] і політетрафторетилен (тефлон) [7]. У зв'язку з цим розглядаються як перспективні напрямки вдосконалення відомих напівпровідникових приладів і створення елементів та матеріалів з новими функціональними властивостями, шляхом використання наповнювачів з нелінійною електропровідністю, зокрема напівпровідникової варисторної кераміки [8, 9] і напівпровідників з ФПМН [10].

Важливим при розробці таких полімерно-напівпровідникових композитів є вивчення впливу їх складу, властивостей полімерної матриці і напівпровідникового наповнювача на характер електропровідності композитів в цілому.

У даній роботі наведено результати дослідження складу, температурних залежностей опору, вольт-амперних характеристик композитів поліпропілен- VO_2 .

2. Зразки та деталі експерименту

Вихідними компонентами композиту були: дрібнодисперсний кристалічний діоксид ванадію (VO_2), отриманий методом відновлення пентаоксиду ванадію (V_2O_5) вуглецем [11], і вторинний гранульований поліпропілен (PP).

Процес синтезу композитів поліпропілен- VO_2 проводився за технологічною схемою, близькою до описаної в [10] і включав наступні етапи:

- механічне подрібнення поліпропілену до розміру часток менш 50 мкм;
- змішування порошку діоксиду ванадію з розміром частинок менш 20 мкм з подрібненим поліпропіленом в порцеляновій ступці;
- пресування шихти під тиском 10 МПа і отримання зразків у вигляді дисків товщиною 0,5–1 мм і діаметром 10 мм;
- прогрівання отриманих дисків при температурі плавлення кристалітів поліпропілену $\sim 160^\circ\text{C}$;
- для поліпшення однорідності зразків проводилося повторне перетирання матеріалу, пресування під тиском 10 МПа у вигляді дисків товщиною 0,5–1 мм і діаметром 10 мм;
- впресовування в зразки електродів із тонкої латунної сітки;
- прогрівання отриманих дисків при температурі біля 160°C протягом 1 години для остаточного формування та стабілізації механічних властивостей зразків..

Дослідження температурних залежностей питомої електричної провідності (або опору) і вольт-амперні характеристики (ВАХ) проводилися загально відомими методами. При цьому зразок розміщувався в екрануючій камері. Температура контролювалася за допомогою лабораторного ртутного термометра з точністю $\pm 0,5^\circ\text{C}$. Реєстрація даних проводилася після встановлення термодинамічної рівноваги досліджуваного зразка з навколишнім середовищем. Швидкість зміни температури при дослідженні температурних залежностей опору була не вище $1^\circ\text{C}/\text{хв}$. Щоб не допустити перегріву зразків при дослідженні ВАХ питома електрична потужність обмежувалася ($< 300 \text{ Вт}/\text{см}^3$).

3. Експериментальні результати та їх обговорення

На рис. 1 приведена залежність питомої електропровідності композиту при

постійному струмі від об'ємної частки кристалитів ванадію.

При збільшенні концентрації наповнювача питома електропровідність композиту зростає до величин, які характерні для електропровідності діоксиду ванадію [12]. Поріг протікання p_c в досліджуваній неоднорідній системі знаходиться в діапазоні значень $p_{VO_2} = 0,3-0,35$. Це відповідає теоретичним уявленням, відомим для перколяційної електропровідності в таких композитах [15]. При переході через температуру ФПМН ($\sim 68^\circ\text{C}$) область залежності $\sigma_0(p_{VO_2})$ зсувається в область більших значень об'ємної частки.

На рис. 2 наведені температурні залежності питомого опору ρ_0 і температурного коефіцієнта опору α_T зразків композитів від об'ємних часток фази діоксиду ванадію.

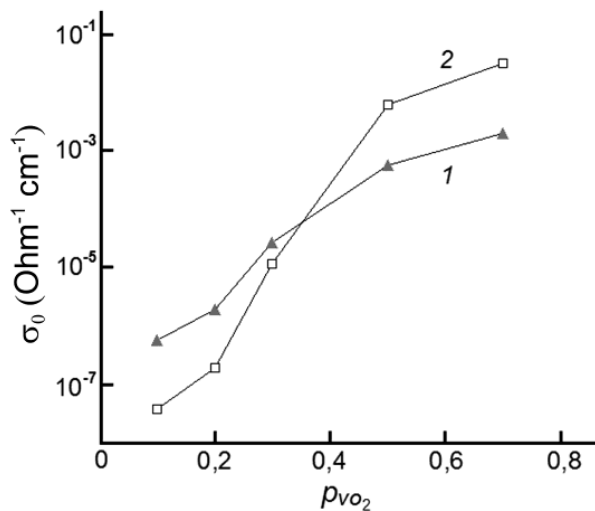
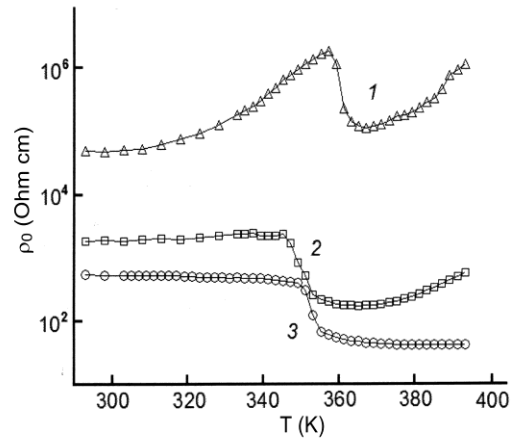


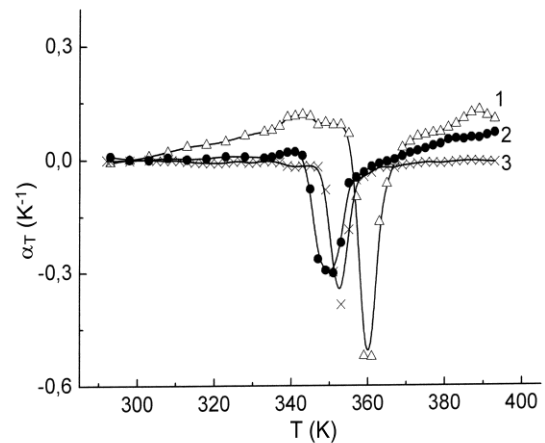
Рис. 1. Залежність питомої електропровідності σ_0 композиту PP-VO₂ від об'ємної концентрації наповнювача при температурах T, К: 1 - 293; 2 - 358.

Для зразків композиту з об'ємною часткою діоксиду ванадію 0,3 як для полімерних композиційних матеріалів з наповнювачем VO₂ на основі поліетилену [15] так і для політетрафторетилену [7] з ростом температури з'являються області зростання опору (1), його стрибкоподібного зниження (2) і подальшого зростання до вихідного (попереднього зниження) значення (3). Залежність $\alpha_T(T)$ має «резонансний» вид: в

області (1) температурний коефіцієнт опору позитивний, в області (2) - негативний, а області (3) – знову позитивний (рис. 2б).



(а)



(б)

Рис. 2. Температурна залежність питомого опору ρ_0 (а) та температурного коефіцієнта опору α_T (б) зразків композитів PP-VO₂ з об'ємною концентрацією діоксиду ванадію: 1 - 0,3; 2 - 0,5; 3 - 0,7.

Стрибкоподібне зменшення опору в області температур $\sim 64^\circ\text{C}$ (2) пов'язано з фазовим переходом метал-напівпровідник в VO₂ [12]. Зростання ρ_0 в температурних діапазонах вище і нижче ФПМН (позисторний ефект), може бути інтерпретовано розривом шляхів протікання електричного струму по

частинкам фази, внаслідок різкого збільшення об'єму полімерної матриці у зазначеній температурній області.

Зі зменшенням об'ємної частки поліпропіленової матриці її вплив на температурну залежність питомого електричного опору композиту послаблюється. Так, для зразка з об'ємною часткою наповнювача $p_{VO_2} = 0,5$, деяке збільшення опору (і позитивний ТКО) спостерігається тільки в температурному діапазоні вище ФПМН (3).

Для зразка з об'ємною часткою наповнювача $p_{VO_2} = 0,7$ позисторних ділянок в температурних залежностях опору не спостерігається. Має місце тільки стрибкоподібне зменшення опору, що характерно для терморезисторів на основі діоксиду ванадію [13]. Це відповідає уявленням про перколяційну електропровідність композитів досліджуваного типу [14, 15]. При об'ємних частках компоненту, що проводить та перевищує порогове значення, електропровідність зразків композиту визначається самим наповнювачем.

Вольт-амперні характеристики досліджуваних зразків композиту поліпропілендіоксид ванадію мають значну нелінійність (рис. 3).

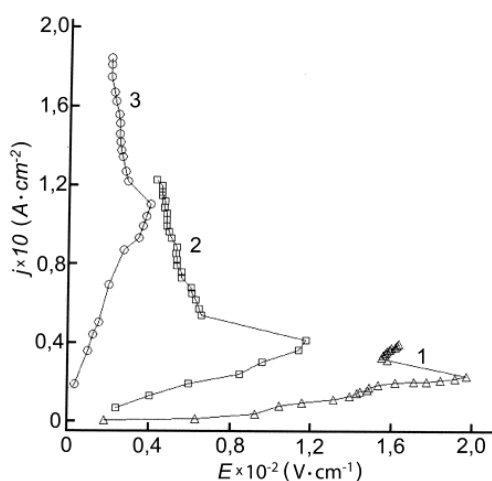
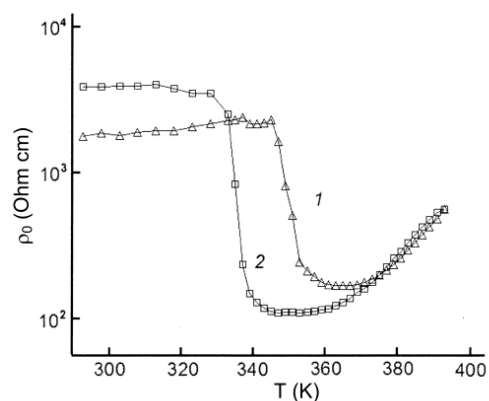


Рис. 3. Вольт-амперні характеристики зразків композитів PP-VO₂ з об'ємною концентрацією діоксиду ванадію: 1 - 0,3; 2 - 0,5; 3 - 0,7.

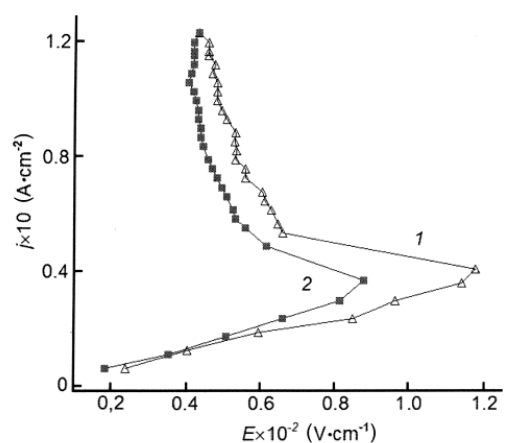
З ростом напруги теплова потужність, що виділяється в зразку, збільшується, і

він нагрівається. При температурі фазового переходу напівпровідник-метал у фазі VO₂ його опір стрибкоподібно зменшується, що веде до істотного перерозподілу електричного поля в такій структурі, і обумовлює спостережувану нелінійність і S-подібність ВАХ, що може призвести до розплавлення поліпропіленової матриці.

ВАХ для зразка з меншими об'ємними частками діоксиду ванадію зміщуються в сторону великих напруженостей електричного поля. Для зразка композиту з $p_{VO_2} = 0,3$ в діапазоні відносно великих струмів (за ділянкою негативної диференціальної провідності) в ВАХ спостерігається початок сублінійної ділянки, що відповідає збільшенню опору зразка внаслідок теплового розширення поліпропіленової матриці.



(а)



(б)

Рис. 4. Температурна залежність питомого опору ρ_0 (а) та вольт-амперних характеристик (б) зразків композитів PP-VO₂ з концентрацією діоксиду ванадію $p_{VO_2} = 0,5$ при нагріванні (1) та охолодженні (2) зразка.

Для зразків з більшою об'ємною часткою цей ефект не спостерігався. В цьому випадку дрібнокристалічний VO_2 утворює в полімерній матриці перколяційні канали провідності, що обумовлюють значне зниження величини питомого опору (рис. 2) і зміщення вольт-амперної характеристики в бік менших напруженостей електричного поля (рис. 3).

Слід зазначити, що проаналізовані температурні залежності питомого електричного опору $\rho(T)$ і ВАХ в досліджуваному композиті мають гістерезисний характер (рис. 4), що, мабуть, пов'язано зі структурними змінами через ФПМН в діоксиді ванадію [4, 5], а також характером протікання релаксаційних процесів деформації в полімерах.

4. Висновки

У роботі показано, що електропровідність композитів PP- VO_2 носить перколяційний характер, а вольт-амперні характеристики мають S-подібну форму.

В температурній залежності електричного опору зразків композитів виявлено стрибкоподібне зменшення опору в області температури фазового переходу напівпровідник-метал в діоксиді ванадію, що є достатнім для застосування в критичних терморезистивних елементах.

Для композитів з об'ємною часткою менше порога протікання виявлено збільшення опору, яке пов'язується із розривом кіл протікання електричного струму по частинкам фази VO_2 внаслідок різкого збільшення об'єму полімерної матриці з ростом температури.

Зі зменшенням об'ємної частки діоксиду ванадію в композиті, вольт-амперні характеристики зміщуються в сторону великих напруженостей електричного поля, а при $p_{\text{vo}_2} \leq 0,3$ і відносно великих струмах спостерігається початок сублінійної ділянки, що відповідає збільшенню опору зразка внаслідок теплового розширення поліпропіленової матриці.

Список використаної літератури

[1]. Cui, Y. Synthesis of vanadium dioxide thin films on conducting oxides and metal-insulator transition characteristics [Text] / Y Cui, X. Wang, Y. Zhou, R. Gordon, S. Ramanathan // Journal of Crystal Growth. – 2012. – Vol. 338. P. 96–102.

[2]. Kizuka, H. Temperature dependence of thermal conductivity of VO_2 thin films across metal-insulator transition [Text] // H. Kizuka, T. Yagi, J. Jia, Y. Yamashita, S. Nakamura, N. Taketoshi and Y. Shigesato // Japan Society of Applied Physics. – 2015. – Vol. 54, № 5. – P. 053201–053208.

[3]. Bruckner, W. Vanadiumoxide: Darstellung, Eigenschaften, Anwendung [Text] / W. Bruckner, H. Opperman, W. Reihelt, J. I. Terukow, F. A. Tschudnowski, E. Wolf. – Berlin: Akademie-Verlag, 1983. – 252 p.

[4]. Ivon, A. I. Stability of electrical properties of vanadium dioxide based ceramics [Text] / A. I. Ivon, V. R. Kolbunov, I.M. Chernenko // Journal of the European Ceramic Society. – 1999. – Vol. 19, № 10. – P. 1883–1888.

[5]. Atkin, J. M. Strain and temperature dependence of the insulating phases of VO_2 near the metal-insulator transition [Text] / J. M. Atkin, S. Berweger, E. K. Chavez, M. B. Raschke // Physical Review B. – 2012. – № 85. – P. 020101(R).

[6]. Kerimov, M. K. Varistor effect in polymer-semiconductor composites [Text] / M. K. Kerimov, M. A. Kurbanov, I. S. Sultanahmedova et al. // Semiconductors. – 2010. – Vol. 44, № 7. – P. 934–942.

[7]. Turov, V. V. Influence of tetraethylammonium bromide on phase inhomogeneity of dispersevanadium dioxide particles in matrix of polyethylene glycol [Text] / V. V. Turov, P. P. Gorbik, V. M. Ogenko et al. // Applied Surface Science. – 2000. – Vol. 166. P. 492–496.

[8]. Hashimov, A. M. Nonlinear resistor based on a polymer-ceramic composition [Text] / A. M. Hashimov, Sh. M. Hasanli, R. N. Mehdizadeh, Sh. M. Azizova, Kh. B. Bayramov // Technical Physics. – 2007. – Vol. 52, № 8. – P. 1086–1088.

[9]. Lyashkov, A.Y. Varistor composites with

a positive temperature coefficient of resistance [Text] / A. Y. Lyashkov, A. S. Tonkoshkur // Technical Physics. – 2011. – Vol. 56, № 3. – P. 427–428.

[10]. Antonova, K. V. Structure and properties of polymer composites based on vanadium dioxide [Text] / K. V. Antonova, V. R. Kolbunov, A. S. Tonkoshkur // Journal of Polymer Research. – 2014. – Vol. 21, № 5. – P. 1-5.

[11]. Ivon, A. I. Process for preparing of vanadium dioxide [Text] / A. I. Ivon, I. M. Chernenko, V. R. Kolbunov // Ukraine Patent 40041 A (UA) – 2001. – №99010384. – 16 Jule 2001.

[12]. Berglund, C. N. Electronic Properties of VO₂ near the Semiconductor-Metal Transi-

tion [Text] / C. N. Berglund, H. J. Guggenheim // Physical Review. – 1969. – Vol. 185, № 3. – P. 1022–1033.

[13]. Kolbunov, V. R. Conductivity of VO₂-based ceramics [Text] / V. R. Kolbunov, A. I. Ivon, I. M. Chernenko // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2006. – Vol. 17, № 1. – P. 57-62.

[14]. Kirkpatrick, S Percolation and Conduction [Text] / S. Kirkpatrick // Reviews of Modern Physics. – 1973. – Vol. 45. –P. 574–588.

[15]. Shklovskii, B. I. Electronic properties of doped semiconductors [Text] / B. I. Shklovskii, A. L. Efros. – Berlin: Springer-Verlag, 1983.

Стаття надійшла до редакції 19.06.2018 р.

UDC 538.956

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150514>

ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF POLYMER COMPOSITE PP-VO₂

V. R. Kolbunov, O. V. Vasheruk

Oles Honchar Dnipro National University
e-mail: kolbunov_vadim@i.ua, vasheruk@ukr.net

Summary

Development of stable volumetric critical thermistors on the basis of a component with phase transition metal-semiconductor on the basis of polycrystalline powders VO₂ polymer composites. The work used empirical research methods. The results of the study of composition, temperature dependences of resistance, volt-ampere characteristics of polypropylene-VO₂ composites are presented.

The analyzed temperature dependences of the specific electrical resistance $\rho(T)$ and the VCC in the investigated composite have a hysteretic character associated with structural changes due to phase transition in vanadium dioxide, as well as the nature of the occurrence of relaxation processes of deformation in polymers

The work presents the results of the study of the electrical conductivity of the direct current samples of a polymer composite polypropylene-vanadium dioxide with a volume fraction of VO₂ from 0.1 to 0.7. It is shown that the conductivity of composites has a percolation character. The percolation transition is in the range of 0.3-0.35 volumetric particles of vanadium dioxide. The volt-current characteristics of samples of a composite with a content of VO₂ of more than 0.35 have an S-shaped shape. In the temperature dependence of the electrical resistance of the samples of composites, a jump-like decrease in resistance was found in the region of the temperature of the phase

transition of the semiconductor-metal in VO_2 . Features in the behavior of electrical conductivity of polymer composites PP- VO_2 , discovered in this work, allow us to talk about the possibility of creating on their basis critical thermoresistive elements.

Keywords: polymer composite, VO_2 , electrical conductivity, temperature dependence of resistance, VCC

УДК 538.956

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150514>

ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ ПОЛІМЕРНОГО КОМПЗИТУ PP- VO_2

В. Р. Колбунов, О. В. Вашерук

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
e-mail: kolbunov_vadim@i.ua, vasheruk@ukr.net

Реферат

Розробка стабільних об'ємних критичних терморезисторів на основі компонента з фазовим переходом метал-напівпровідник на основі полікристалічних порошків VO_2 полімерних композитів. В роботі використовувалися методи емпіричного дослідження

Наведено результати дослідження складу, температурних залежностей опору, вольт-амперних характеристик композитів поліпропілен – VO_2 .

Проаналізовані температурні залежності питомого електричного опору $\rho(T)$ і і вольт-амперної характеристики в досліджуваному композиті мають гістерезисний характер, що, пов'язано зі структурними змінами через фазовий перехід в діоксиді ванадію, а також характером протікання релаксаційних процесів деформації в полімерах.

В роботі представлені результати дослідження електропровідності при постійному струмі зразків полімерного композиту поліпропілен-діоксид ванадію з об'ємною часткою VO_2 від 0,1 до 0,7. Показано, що електропровідність композитів носить перколяційний характер. Перколяційний перехід знаходиться в області 0,3-0,35 об'ємних часток діоксиду ванадію. Вольт-амперні характеристики зразків композиту із вмістом VO_2 більше 0,35 мають S-подібну форму. У залежності електричного опору зразків композитів від температури виявлено стрибкоподібне зменшення опору в області температури фазового переходу напівпровідник-метал в VO_2 . Особливості електропровідності полімерних композитів PP- VO_2 , що виявлені у цій роботі, дозволяють робити висновки про можливість створення на їх основі критичних терморезистивних елементів.

Ключові слова: полімерний композит, VO_2 , електропровідність, температурна залежність опору, ВАХ

МАТЕРІАЛИ ДЛЯ СЕНСОРІВ

SENSOR MATERIALS

УДК 54.03, PACS 81.70.PG

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150518>

ВОЛОГО І ЕТАНОЛО ЧУТЛИВІСТЬ ТОНКИХ ПЛІВОК ДІОКСИДУ ОЛОВА, ОТРИМАНИХ З ВИКОРИСТАННЯМ ПОЛІМЕРІВ

Л. М. Філевська, А. П. Чебаненко, М. А. Клочков, В. С. Гріневич, В. А. Сминтина

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова, вул. Дворянська, 2, Одеса, 65082,
Україна, lfilevska@gmail.com

ВОЛОГО І ЕТАНОЛО ЧУТЛИВІСТЬ ТОНКИХ ПЛІВОК ДІОКСИДУ ОЛОВА, ОТРИМАНИХ З ВИКОРИСТАННЯМ ПОЛІМЕРІВ

Л. М. Філевська, А. П. Чебаненко, М. А. Клочков, В. С. Гріневич, В. А. Сминтина

Анотація. Досліджені електрофізичні властивості нанорозмірних шарів SnO₂, отриманих з використанням ПВА у якості структуруючої добавки, в присутності парів води та етанолу при кімнатній температурі. Встановлено майже десятикратне підвищення провідності досліджуваних шарів в присутності парів води і п'ятикратне в присутності парів етанолу порівняно з значенням у сухому повітрі, пов'язане з дисоціативною адсорбцією води і етанолу на їх поверхні. Встановлений аномальний характер температурної залежності темного струму шарів діоксиду олова в присутності парів води в інтервалі температур 40–90 °С, пов'язаний з десорбційними процесами на поверхні. Отримані результати показують можливість використання досліджуваних шарів діоксиду олова для контролю вологи і етанолу при кімнатній температурі.

Ключові слова: Діоксид олова, вологочутливість, етанолочутливість

SENSITIVITY OF THIN TIN DIOXIDE FILMS OBTAINED WITH THE USE OF POLYMERS TO HUMIDITY AND ETHANOL

L. Filevska, A. Chebanenko, M. Klochkov, V. Grinevych, V. Smyntyna

Abstract. Electrophysical properties of nanosized SnO₂ layers obtained using PVA as a structural additive in the presence of water and ethanol vapor at room temperature have been investigated. It is established almost the tenfold increase of conductivity of investigated layers in the presence of water vapor and the five times one in the presence of ethanol vapors compared with its value in dry air which is caused by dissociative adsorption of water and ethanol on their surfaces. An abnormal nature of the dark current temperature dependence of tin dioxide layers in the presence of water vapor in the temperature range 40–90 °C is associated with desorption processes on the surface. The obtained results show the possibility of using the investigated layers of tin dioxide for a moisture and ethanol detection at room temperature.

Keyword: tin dioxide, moisture sensitivity, ethanol sensitivity.

ВЛАГО И ЭТАНОЛО ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ТОНКИХ ПЛЕНОК ДИОКСИДА ОЛОВА, ПОЛУЧЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОЛИМЕРОВ

Л. Н. Филевская, А. П. Чебаненко, М. А. Клочков, В. С. Гриневиц, В. А. Смынтина

Аннотация Исследованы электрофизические свойства наноразмерных слоев SnO₂, полученных с использованием ПВА в качестве структурирующей добавки, в присутствии паров воды и этанола при комнатной температуре. Установлено почти десятикратное повышение проводимости исследуемых слоев в присутствии паров воды и пятикратное в присутствии паров этанола по сравнению со значением в сухом воздухе, связанные с диссоциативной адсорбцией воды и этанола на их поверхности. Установленный аномальный характер температурной зависимости темнового тока слоев диоксида олова в присутствии паров воды в интервале температур 40–90 °C обусловлен десорбционными процессами на поверхности. Полученные результаты показывают возможность использования исследованных слоев диоксида олова для контроля влаги и этанола при комнатной температуре.

Ключевые слова: Диоксид олова, влажочувствительность, этанолочувствительность.

Великий інтерес до напівпровідникових газових сенсорів на основі плівок діоксиду олова зумовлений відносною дешевизною, високою чутливістю і хімічною стійкістю сполуки. Оскільки процес зондування газу пов'язаний з хімічними реакціями на поверхні, чутливість таких сенсорних елементів залежить від факторів, які їх зумовлюють, зокрема, від морфології їх поверхні, їх мікроструктури, хімічних сполук на поверхні, температури і вологості [1]. Саме тому вплив вологи атмосферного повітря на провідність SnO_2 завжди необхідно враховувати при використанні цього матеріалу в якості сенсора.

Досить високі робочі температури (близько 200°C і більше) стримують можливості застосування сенсорів на основі діоксиду олова. Зниження робочої температури металооксидного адсорбційно-чутливого елемента як наслідок посилення кінетики поверхневих реакцій відбувається при збільшенні кількості доступних центрів адсорбції газу на поверхні плівки. Серед методів зниження робочих температур сенсорів на основі діоксиду олова модифікація поверхні каталітичними домішками [2], спрямований на адсорбційні центри оптичний або польовий вплив [3] та ін. Одним із шляхів подолання цієї проблеми є наноструктурування адсорбційно-чутливого матеріалу. Зокрема, автори [4], використовуючи в сенсорі двоокису азоту нанопроволоки SnO_2 як чутливий елемент, досягли зниження його робочої температури до 50°C . В [5] методом високочастотного магнетронного розпилення отримані плівки SnO_2 , що складаються з орієнтованих перпендикулярно підкладці кристалітів-нанострижнів. Така морфологія забезпечила чутливість плівок до парів етанолу при температурі 38°C внаслідок доступу газів до поверхні зерен практично по всій товщині плівки. Для отримання нанорозмірних форм діоксиду олова широко використовуються золь-гель методи. Золь-гель або розчини на його основі поєднують високу ступінь гнучкості з простотою, можливістю зміни властивостей матеріалу і утворення кристалітів [6].

В роботі досліджені електрофізичні та адсорбційно-чутливі властивості до парів води

та етанолу при кімнатній температурі нанорозмірних шарів двоокису олова, отриманих з використанням полімеру (ПВА) у якості структурируючої добавки.

Методи отримання зразків та проведення досліджень

Шари SnO_2 отримані простим і економічним золь-гель методом, в якому в якості прекурсору використаний діхлордіацетилацетат олова [7], в якості структурируючої речовини використовувався полівінілацетат (ПВА) [8]. Розчини вихідних речовин в ацетоні змішувалися в необхідних пропорціях. Гель, що утворився, наносився на скляні підкладки, після чого проводився високотемпературний відпал на повітрі. У результаті відпалу, що забезпечував розпад і видалення продуктів розпаду прекурсору і полімеру, а також доокислення, утворювалися тонкі шари двоокису олова. Профілі поверхні, отримані за допомогою АСМ-мікроскопії, показали, що поверхня плівок SnO_2 має розвинену стовпчасту структуру із середнім поперечним розміром кристалітів близько 20 \AA . Таким чином, одержувані золь-гель методом плівки діоксиду олова є наноструктурованими з високим ступенем розвиненості поверхні.

Методика вимірювань електрофізичних характеристик наноплівок SnO_2 базується на стандартному фіксуванні ВАХ і ТЗТТ, тобто реєстрації залежності струму від прикладеної до зразка напруги або зміни температури зразка. Для вимірювання електричних характеристик досліджуваних плівок SnO_2 забезпечувалися контактами з індію, який термічно напильюють у високому вакуумі на поверхні плівок у вигляді двох паралельних смужок. Відстань між електродами становила 2 мм.

Результати та обговорення

Вольт-амперні характеристики отриманих плівок SnO_2 вимірювались на повітрі, в парах води та етанолу (рис. 1). Можна помітити, що значення сили струму на ВАХ в парах води майже на порядок більше, ніж при тих же значеннях прикладеної напруги на ВАХ в

атмосфері сухого повітря. Підвищення електропровідності в парах води пов'язане з дисоціативною адсорбцією води на поверхні досліджуваних плівок [9]. Відповідно до цього механізму на поверхні мікро кристала SnO_2 молекула води дисоціює на гідроксильну групу OH^- і H^+ . Група OH^- локалізується на поверхневому атомі олова, віддаючи електрон у зону провідності напівпровідника. Протон H^+ захоплюється адсорбованим на поверхні іоном O^- , утворюючи нейтральну групу OH . Таким чином, у результаті процесу адсорбції молекули води формуються дві гідроксильні групи OH і зникає іон O^- . Це приводить до збільшення провідності [10].

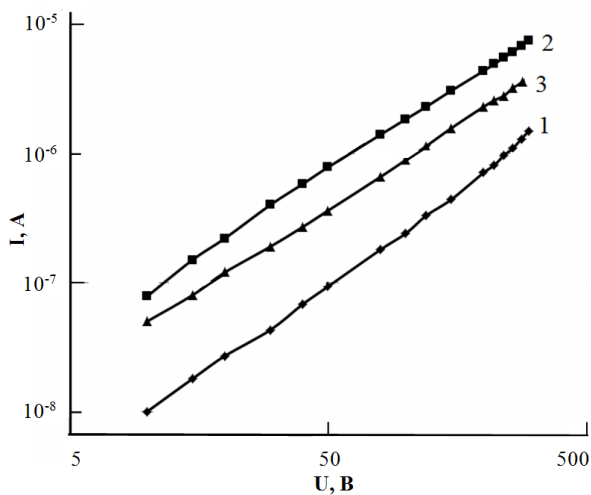


Рис. 1. Вольт-амперні характеристики плівки SnO_2 в повітрі (1), в парах води (2) і в парах етанолу (3). ($T=290$ К).

Електропровідність плівок в парах етилового спирту також збільшується, але меншою мірою в порівнянні з парами води. Більші розміри й більш складна структура молекули етанолу ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) ніж молекули води ускладнюють адсорбцію етилового спирту на поверхні плівки діоксиду олова. До того ж, під час дисоціативної адсорбції від молекули етанолу може відщепитися лише одна OH^- група, яка, локалізуючись на поверхневому атомі олова, віддає лише один електрон у зону провідності SnO_2 . Протон H^+ , як у випадку дисоціації молекули води, при цьому не утворюється.

Температурна залежність електропровідності плівки SnO_2 в присутності парів води (рис.2), містить «аномальну» ділянку зменшення провідності з ростом температури. При досягненні температури близько 90°C спадаюча ділянка змінюється зростаючою. Електропровідність збільшується з температурою за експоненціальним законом з енергією активації (0,56-0,6) еВ. Вимірювання залежності $G(T)$ у порядку охолодження зразка SnO_2 вказують на наявність у неї гістерезису. Схожий «аномальний» хід кривої температурної залежності провідності спостерігався авторами [11] і може бути пояснений у такий спосіб. Підвищення температури веде до десорбції фізично адсорбованої води й гідроксильних груп. Це збільшує на поверхні плівки SnO_2 кількість місць для адсорбції кисню, що приводить до зниження провідності. Подальше підвищення температури викликає десорбцію кисню й, відповідно, підвищує провідність. На користь останнього свідчить той факт, що отримані значення енергії активації з (0,56 - 0,6) еВ близькі до розрахованих в [12] енергій десорбції молекулярного кисню ($E_a=0,59$ еВ) з поверхні діоксиду олова. Виникнення гістерезису в залежності $G(T)$ автори [13] пов'язують з погіршенням дифузії молекул води й кисню в нанорозмірних порах плівки діоксиду олова.

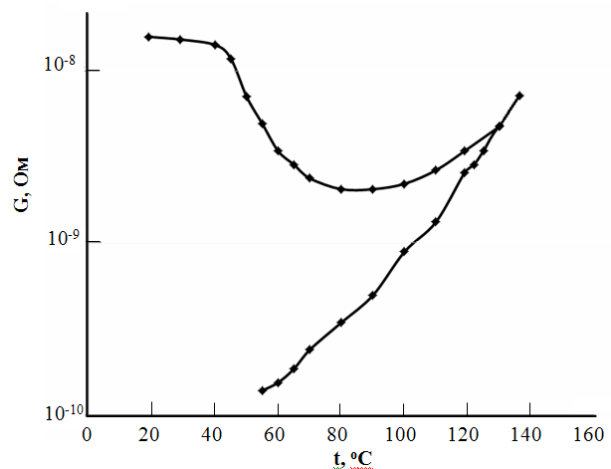


Рис. 2. Температурна залежність електропровідності плівки SnO_2 в парах води. ($U=80$ В).

Дослідження кінетики змін провідності шарів SnO_2 в присутності та відсутності парів води та етанолу при кімнатній температурі показало високу швидкість реакції чутливого шару. Зміна провідності на порядок при контакті з парами води та при їх видаленні відбувалася протягом 10 с. При чому, після видалення вологи відбувалося повне відновлення величини сили струму. Пари етанолу змінюють силу струму лише в 5 разів, але також швидко відновлюється її початкова величина. Приведені результати свідчать про можливість застосування вказаних плівок SnO_2 в якості чутливих елементів для сенсорів вологи та парів етилового спирту, що працюють при кімнатній температурі.

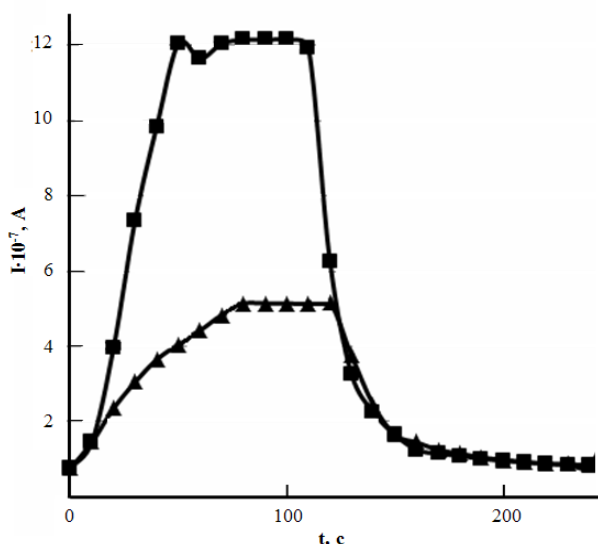


Рис. 3. Кінетика змін провідності шарів SnO_2 в присутності та відсутності парів води (квадрати) та етанолу (трикутники)

Заключення

Встановлено майже десятикратне підвищення провідності досліджуваних шарів в присутності парів води порівняно з значенням у сухому повітрі пов'язане з дисоціативною адсорбцією води на їх поверхні.

Пари етанолу також ведуть до збільшення провідності шарів діоксиду олова, але меншою мірою, ніж пари води. Зумовлено останнє розбіжностями в розмірі молекул $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ і H_2O , а також різним характером дисоціації молекул етанолу і води на поверхні SnO_2 .

Встановлено наявність аномального характеру температурної залежності темного струму шарів діоксиду олова в присутності парів води в інтервалі температур 40 – 90 °С. Підвищення температури стимулює десорбцію фізично адсорбованої води та гідроксильних груп, місце яких заповнюється киснем і, як наслідок, спостерігається зниження провідності.

Отримані результати показують можливість використання досліджуваних шарів діоксиду олова для контролю вологи і етанолу при кімнатній температурі.

Список використаної літератури

- [1]. C. Wang, L. Yin, L. Zhang, D. Xiang, R. Gao. Metal oxide gas sensors: sensitivity and influencing factors // Sensors.- 2010.- 10, № 3, – Р. 2088 - 2106.
- [2]. К. Н. Багнюков, В. А. Буслов, С. В. Овсянников Повышение селективности датчика на основе SnO_2 к парам спирта в воздухе. - Твердотельная электроника и микроэлектроника, межвуз. сб. науч. тр. – Воронеж: ФГБОУ ВПО «Воронежский государственный технический университет», 2013. - Вып. 12. - С. 156 - 160.
- [3]. Овсянников С.В. Тепловая, полевая и оптическая активация газочувствительных процессов в микроэлектронных газовых датчиках на основе SnO_2 . – Дисс.... канд. физ. – мат.наук, Воронеж, 2016.- 164 с.
- [4]. Park Jae-Hwan, Cho Mun-Seong, Lim Donggun. SnO_2 Nanowire Gas Sensor Operating at Room Temperature // Journal of Nanoscience and Nanotechnology. – 2014. - V. 14. - P. 8038-8042.
- [5]. Вениг С.Б., Махди О.С., Мальяр И.В., Синев И.В., Смирнов А.В., Кисин В.В. – Морфология тонких пленок диоксида олова, обладающих газочувствительностью при температуре, близкой к комнатной. - Известия Саратов. ун-та, Нов.сер. Серия Физика. – 2015. - Т. 15, вып. 4. - С. 17-21.
- [6]. Brinker C.J. Sol-Gel Science: The Physics and Chemistry of Sol-Gel Processing / Brinker C.J., Scherer G.W. // Academic Press Inc., 1990 – 908. 155p.

[7]. B. Ulug, H.M. Türkdemir, A. Ulug, O. Büyükgüngör, M.B. Yücel, V.A. Smyntyna, V.S. Grinevich, L.N. Filevskaya. Structure, spectroscopic and thermal characterization of bis(acetylacetonato)dichlorotin(IV) synthesized in aqueous solution // Ukrainian chemical journal. – 2010. – Т. 76, №7. – С. 12-17.

[8]. Filevskaya L.N., Smyntyna V.A., Grinevich V.S. Morphology of nanostructured SnO₂ films prepared with polymers employment// Photoelectronics. - 2006. - №15. – P.11-14.

[9]. Kalinina M.V., Moshnikov V.A., Tikhonov P.A., Tolmaev V.V., Mikhailichenko S.V. Temperature dependence of the resistivity for metal-oxide semiconductors based on tin dioxide // Glass physics and chemistry. – 2003. - V.29, № 4. - P.422-427.

[10]. Алмаев А.В., Сергейченко Н.В., Рудов Ф.В. Влияние уровня влажнос-

ти на характеристики сенсоров водорода на основе тонких плёнок SnO₂. // Мат. XX Международной научно-практической конф. Томск. – 2014. - с. 315-317.

[11]. Harrison P.G., Willett M.I. Tin oxide surfaces: electrical properties of tin oxide del. // I. Chem. Soc. Faraday. Trans.1. – 1989, – V.85, №8. - P.1921-1932.

[12]. Oiedo I., Gillan M.I. First-principles study of the interaction of oxygen with the SnO₂ surface. // Surface Science. – 2001. - V.490, №3. - P.221-236.

[13]. I.A. Ryzhikov, A.A. Pukhov, A.S. Il'in, N.P. Glukhova, K.N. Afanasiev, A.S. Ryzhikov. Anomalous temperature dependence of the conductivity of nanoporous ITO films // Microelectronic Engineering. – 2003. - V.69, №2. - P.270-273.

Стаття надійшла до редакції 11.09.2018 р.

UDC 54.03, PACS 81.70.PG

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150518>

SENSITIVITY OF THIN TIN DIOXIDE FILMS OBTAINED WITH THE USE OF POLYMERS TO HUMIDITY AND ETHANOL

L. Filevska, A. Chebanenko, M. Klochkov, V. Grinevych, V. Smyntyna

Odessa I.I. Mechnikov National University, Dvoryanskaya str., 2, Odessa, 65082, Ukraine,
lfilevska@gmail.com

Summary

Aim. Establishing the sensitivity of thin tin dioxide layers' conductivity obtained using a polymer, to water vapor and ethanol at room temperature.

Methods. SnO₂ layers are obtained by a simple and economical sol-gel method, in which the Bis-(acetylacetonato)dichlorotin was used as a precursor, while polyvinyl acetate was used as a structuring substance. The measuring method of the electrophysical characteristics of SnO₂ nanofilms is based on the standard fixation of Volt/Current characteristics, Dark Current Temperature Dependence, and conductivity kinetics in the atmosphere of dry air and in the presence of vapors of detectable substances.

Results. It is established almost the ten times increase of conductivity of investigated layers in the presence of water vapor and the five times one in the presence of ethanol vapors compared with the values in dry air which are due to dissociative adsorption of water and ethanol on their surfaces.

An abnormal nature of the dark current temperature dependence of tin dioxide layers in the presence of water vapor in the temperature range 40 - 90 °C is associated with desorption processes on the surface.

Conclusions. The sensitivity of tin dioxide thin layers conductivity obtained using a polymer to water vapor and ethanol at room temperature is shown. It is concluded about the possibility to use them for humidity and ethanol control at room temperature.

Keywords: tin dioxide, sensitivity to humidity and to ethanol

УДК 54.03, PACS 81.70.PG

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150518>

ВОЛОГО І ЕТАНОЛО ЧУТЛИВІСТЬ ТОНКИХ ПЛІВОК ДІОКСИДУ ОЛОВА, ОТРИМАНИХ З ВИКОРИСТАННЯМ ПОЛІМЕРІВ

Л. М. Філевська, А. П. Чебаненко, М. А. Клочков, В. С. Гріневич, В. А. Сминтина

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, вул. Дворянська, 2, Одеса, 65082,
Україна, lfilevska@gmail.com

Реферат

Мета. Встановлення наявності чутливості провідності тонких шарів діоксиду олова, отриманих з використанням полімеру, до парів води і етанолу при кімнатній температурі.

Методи дослідження. Шари SnO₂ отримані простим і економічним золь-гель методом, в якому в якості прекурсору використаний діхлордіацетилацетонат олова, в якості структуруючої речовини використовувався полівінілацетат. Методика вимірювань електрофізичних характеристик наноплівки SnO₂ базується на стандартному фіксуванні ВАХ, ТЗТТ, і кінетики провідності в атмосфері сухого повітря і в присутності парів детектуємих речовин.

Результати дослідження. Встановлено майже десятикратне підвищення провідності досліджуваних шарів в присутності парів води і п'ятикратне в присутності парів етанолу порівняно з значенням у сухому повітрі пов'язане з дисоціативною адсорбцією води і етанолу на їх поверхні. Встановлений аномальний характер температурної залежності темного струму шарів діоксиду олова в присутності парів води в інтервалі температур 40 – 90 °C пов'язаний з десорбційними процесами на поверхні.

Висновки. Встановлена чутливість провідності тонких шарів діоксиду олова, отриманих з використанням полімеру, до парів води і етанолу при кімнатній температурі показує можливість їх використання для контролю вологості і етанолу при кімнатній температурі.

Ключові слова: Діоксид олова, вологочутливість, етанолочутливість

СЕНСОРИ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ СИСТЕМИ

SENSORS AND INFORMATION SYSTEMS

УДК 621.317

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150520>

ОПТИМИЗАЦИЯ СТРУКТУРЫ И АЛГОРИТМА РАБОТЫ ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНОЙ МУЛЬТИСЕНСОРНОЙ СИСТЕМЫ С ИМПЕДАНСНЫМИ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯМИ

В. Г. Мельник, П. И. Борщев, А. Д. Василенко, А. В. Слицкий

Институт электродинамики НАН Украины пр. Победы 56, г. Киев-57, 03057, Украина,
тел. +38-044-366-25-11, E-mail: melnik@ied.org.ua

ОПТИМИЗАЦИЯ СТРУКТУРЫ И АЛГОРИТМА РАБОТЫ ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНОЙ МУЛЬТИСЕНСОРНОЙ СИСТЕМЫ С ИМПЕДАНСНЫМИ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯМИ

В. Г. Мельник, П. И. Борщев, А. Д. Василенко, А. В. Слицкий

Аннотация. В работе рассматривается новый способ параллельно-последовательного преобразования слабых информативных сигналов при многопараметровых исследованиях быстропротекающих процессов. Разработанное решение позволяет получить 18-битовые результаты с частотой 100 Гц при асинхронности отсчетов измеряемых величин не хуже $\pm 3,3$ мсек, высокой чувствительности и подавлении помех с частотой 50 Гц. Рассмотрена структура и алгоритм работы унифицированного трехканального измерительного блока на основе мостовых цепей переменного тока и интегрирующих АЦП типа MAX-132, разработанные в Институте электродинамики НАН Украины. Приведены результаты тестирования такого устройства. Предложенный измерительный канал может использоваться в одноканальном

режиме с любым из трех сенсоров с трехкратным повышением частоты отсчетов или с соответствующим сужением шумовой полосы.

Ключевые слова: многоканальная сенсорная система, чувствительность, быстродействие, помехоустойчивость, интегрирующие АЦП

ОПТИМІЗАЦІЯ СТРУКТУРИ ТА АЛГОРИТМУ РОБОТИ ВИСОКОЧУТЛИВОЇ МУЛЬТИСЕНСОРНОЇ СИСТЕМИ З ІМПЕДАНСНИМИ ДАТЧИКАМИ

В. Г. Мельник, П. І. Борщов, О. Д. Василенко, О. В. Сліцький

Анотація. В роботі розглядається новий спосіб паралельно-послідовного перетворення сигналів для багатопараметрових досліджень швидкоплинних процесів з використанням високочутливих мультибіосенсорних систем. Розроблене рішення дозволяє отримати 18-бітові результати з частотою 100 Гц при асинхронності відліків вимірюваних величин не гірше $\pm 3,3$ мсек, високу чутливість та придушення завад з частотою 50 Гц. Розглянуто структуру та алгоритм роботи уніфікованого трьохканального вимірювального блоку на основі мостових кіл змінного струму та інтегруючих АЦП типу MAX-132, які розроблено в Інституті електродинаміки НАН України. Запропонований вимірювальний канал може використовуватись в одноканальному режимі з будь-яким з трьох сенсорів з триразовим підвищенням частоти відліків або з відповідним звуженням шумової смуги.

Ключові слова: багатоканальна сенсорна система, чутливість, швидкодія, завадостійкість, інтегруючий АЦП

OPTIMIZATION OF THE STRUCTURE AND ALGORITHM OF THE WORK OF THE HIGHLY-SENSITIVE MULTI-SENSORS SYSTEM WITH IMPEDANCE TRANSDUCERS

V. G. Melnik, P. I. Borshchev, A. D. Vasylenko, A. V. Slitskiy

Abstract. The paper considers the new method of parallel-sequential transformation of signals for multi-parameter studies of fast processes using highly sensitive multi-biosensor systems. The developed solution allows to obtain 18-bit results with a frequency of 100 Hz, with asynchrony of samples of the measured values no worse than $\pm 3,3$ msec, high sensitivity and suppression of interference on the frequency 50 Hz. The structure and algorithm of operation of the unified three-channel measuring unit based on AC-bridges with using the integrating type ADC MAX-132, which are developed at the Institute of Electrodynamics of the National Academy of Sciences of Ukraine, are considered. The proposed measuring channel can be used in a single-channel mode with any of three sensors with three-fold increase in the sampling frequency.

Keywords: multichannel sensor system, sensitivity, speed of measuring, noise immunity, integrating ADC

ВВЕДЕНИЕ. При разработках высокопроизводительных многоканальных измерительных систем для контроля многопараметровых динамических процессов всегда возникает проблема совмещения высокой частоты и достаточной синхронности отсчетов по совокупности определяемых величин с высокой чувствительностью, помехоустойчивостью и приемлемой сложностью аппаратно-программного комплекса. Особенно актуальна данная проблема в биомедицинских измерениях, в частности при построении высокочувствительных биосенсорных систем, поскольку получение каждого отсчета требует довольно длительного накопления энергии слабого сигнала. Обычно для ее решения применяют параллельно-последовательную организацию процесса измерения, когда часть преобразований измеряемых величин выполняется одновременно (параллельно) отдельными ветвями измерительного канала, а другая – его общей частью последовательно во времени. Такой путь повышения информационной производительности измерительных средств широко применяется, в частности, в распределенных системах сбора данных. Методы организации параллельно-последовательных процессов цифровой обработки данных и средства для них достаточно хорошо отработаны и широко применяются, например [1-3]. В то же время в первичных звеньях измерительных каналов, где формируются первичные данные, имеются значительные резервы для увеличения объемов информации, получаемых в единицу времени.

В импедансометрических сенсорных системах первичный и вторичный измерительные преобразователи образуют мостовую цепь резистивного, емкостного или кондуктометрического типа, которая выделяет и нормирует по величине слабый информативный сигнал переменного тока, который может иметь частоту в широком диапазоне (до десятков кГц и более). Вместе с генератором тестового сигнала, синхронным детектором и АЦП мостовая цепь образует единый блок преобразователя пассивной электрической величины в код, сочетающий нужные

функции с высокой чувствительностью, помехоустойчивостью, простотой конструкции и невысокой стоимостью. Такие качества в существующих измерительных системах достигаются структурно-алгоритмическими решениями, которые ограничивают возможности известных методов параллельно-последовательного преобразования сигналов.

В этой работе рассматривается новый способ параллельно-последовательного преобразования для 3-х сенсорной системы, позволяющий получить высокую частоту выдачи данных по каждому из каналов с хорошей синхронностью измерений определяемых величин и достаточно глубоком подавлении промышленных помех с частотой 50 Гц. Такая система реализуется на основе унифицированного базового измерительного модуля, разработанного в Институте электродинамики НАН Украины, содержащего 3 высокочувствительных, 18-битовых, интегрирующих (“multi-slope”) АЦП (типа МАХ-132, например) и, соответственно, 3 мостовые схемы [4]. Координация съема данных с сенсоров производится по методу, предложенному в [5].

Предложенный способ измерения кратко состоит в следующем. Тактирование АЦП производится с частотой, обеспечивающей длительность цикла преобразования (выдачи результатов) 10 мсек. Интегрирования информативных сигналов в них происходят в течении примерно 3,3 мсек. после команды запуска соответствующего АЦП. Запуски 3-х АЦП выполняются последовательно через 3,3 мсек. Парное усреднение результатов 2-х смежных преобразований одного АЦП позволяет подавить промышленную помеху с частотой 50 Гц и получить полосу пропускания канала 150 Гц. Полученные при этом данные могут дополнительно усредняться для сужения шумовой полосы канала. Усреднение пяти пар результатов позволяет сузить ее до 50 Гц. Выдача данных в этом случае также происходит через 10 мсек. при асинхронности измерений в 1-м и 3-м каналах $\pm 3,3$ мсек. по отношению ко второму каналу.

СТРУКТУРА И АЛГОРИТМ РАБОТЫ МНОГОКАНАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ.

Рассмотрим более детально измерительные возможности трехканального блока преобразования сигналов сенсоров с тремя интегрирующими 18-битовыми “multi-slope” АЦП типа MAX-132, реализованного на основе унифицированного базового модуля MXP-4. На рис.1 изображена его блок-схема, а на рис.2 –временные диаграммы работы при тактовой частоте 200 кГц (цикл преобразования 10 мсек).

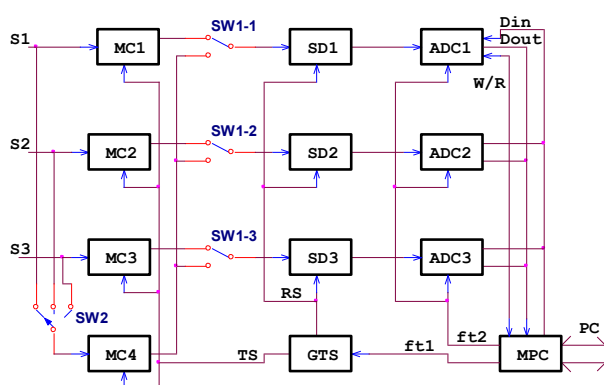


Рисунок 1. Унифицированный быстродействующий блок преобразования сигналов сенсоров многоканальной измерительной системы.

Сенсоры S1 – S3 измеряемых величин подключаются к измерительным цепям MC1 – MC4. На них подается синусоидальный тестовый сигнал TS с частотой, оптимальной для сенсоров от цифрового генератора GTS, который тактируется импульсами с частотой f_{T1} , формируемыми микропроцессорным контроллером MPC.

Тактовые импульсы с частотой f_{T2} , близкой к 200 кГц, используются для тактирования АЦП ADC1 – ADC3. Оптимальное значение этой частоты определяется частотой промышленных помех. Тактовая частота около 200 кГц соответствует сетям с частотой 50 Гц. Отклонение f_{T2} от оптимального значения снижает коэффициент подавления сетевых помех, поэтому целесообразно регулировать f_{T2} при колебаниях частоты сети. Решение этой проблемы может быть задачей для последующих разработок.

На входах АЦП установлены ключевые синхронные детекторы SD, которые управляются опорным сигналом RS, синфазным или квадратурным с TS. Вместе с АЦП они образуют фазочувствительные векторные микровольтметры, позволяющие определять две составляющие (Re и Im) информативных сигналов сенсоров. Учитывая малое время интегрирования (3,3 мсек.), диапазон рабочих частот TS ограничен снизу и имеет практические пределы от единиц до нескольких сотен кГц. При выборе рабочей частоты следует также учитывать желательность кратности его периода и времени интегрирования АЦП [6]. В то же время отметим, что затормозив SD, мы можем измерять мгновенные значения информативных сигналов. При рассматриваемых параметрах канала это позволяет проводить измерения в области инфранизких (дозвуковых) частот.

Переключатель SW1 служит для подключения информативных сигналов сенсоров, выделенных и пронормированных измерительными цепями MC, к входам фазочувствительных микровольтметров. В их верхнем положении блок функционирует в трехканальном режиме, а в нижнем положении переводится в одноканальный режим с повышенной чувствительностью и более глубоким подавлением всей совокупности гармоник промышленной помехи. Это достигается осуществлением непрерывного интегрирования информативного сигнала одного из сенсоров, который поступает с выхода измерительной цепи MC4 на входы всех микровольтметров. Данные преобразования трех АЦП усредняются микроконтроллером за 2 цикла их работы. При этом общее время интегрирования составляет 20 мсек., а использованная энергия сигнала увеличивается в 6 раз. Дискретность преобразования при этом возрастает до 20 бит в диапазоне входных сигналов $\pm 0,5$ В. Минимально возможная асинхронность измерений при последовательном подключении трех сенсоров S1 – S3 переключателем SW2 составит ± 20 мсек. Такой режим может использоваться для исследования более медленных процессов со слабыми информативными сигналами. При

необходимости иметь большее, чем 3, число каналов, можно организовать параллельную работу нескольких таких унифицированных измерительных блоков.

Рассмотрим временные диаграммы получения и обработки данных для наиболее актуальных режимов измерений.

На графике 1 показано расположение во времени 6-ти команд запуска АЦП-1 – АЦП-3 ($1_1, 1_2, 1_3 \dots 6_1, 6_2, 6_3$). Команды запуска и, соответственно, интервалы интегрирования расположены со сдвигом на время интегрирования, равное 3,3 мсек. (графики 2 - 4). Таким образом, в цикле преобразования одного АЦП происходит непрерывное интегрирование сигнала последовательно тремя АЦП. Преобразованные в цифровой код результаты этих интегрирований (выходные данные) выдаются каждым из АЦП с задержкой на два интервала интегрирования (графики 5 - 7). Они могут быть объединены в общий

поток данных с частотой около 300 отсчетов/сек. (график 8) или использоваться отдельно для трех разных сигналов.

Совместное использование результатов интегрирования тремя АЦП в цикле преобразования одного АЦП позволяет получить интервал усреднения (цикл интегрирования) сигнала равный времени цикла преобразования АЦП (график 9). Усредненные данные за такой цикл вырабатываются с задержкой на два времени интегрирования (график 10). Используя скользящее усреднение общего потока данных можно выдавать результаты с частотой около 300 Гц. Интегрирование сигнала каждым из АЦП происходит в течение 3,3 мсек с интервалами около 10 мсек. Усреднение результатов двух смежных интегрирований (графики 11 – 13 и 16) позволяет подавить индустриальную помеху (50 Гц) при частоте выдачи данных каждым АЦП около 100 Гц и частоте общего потока около

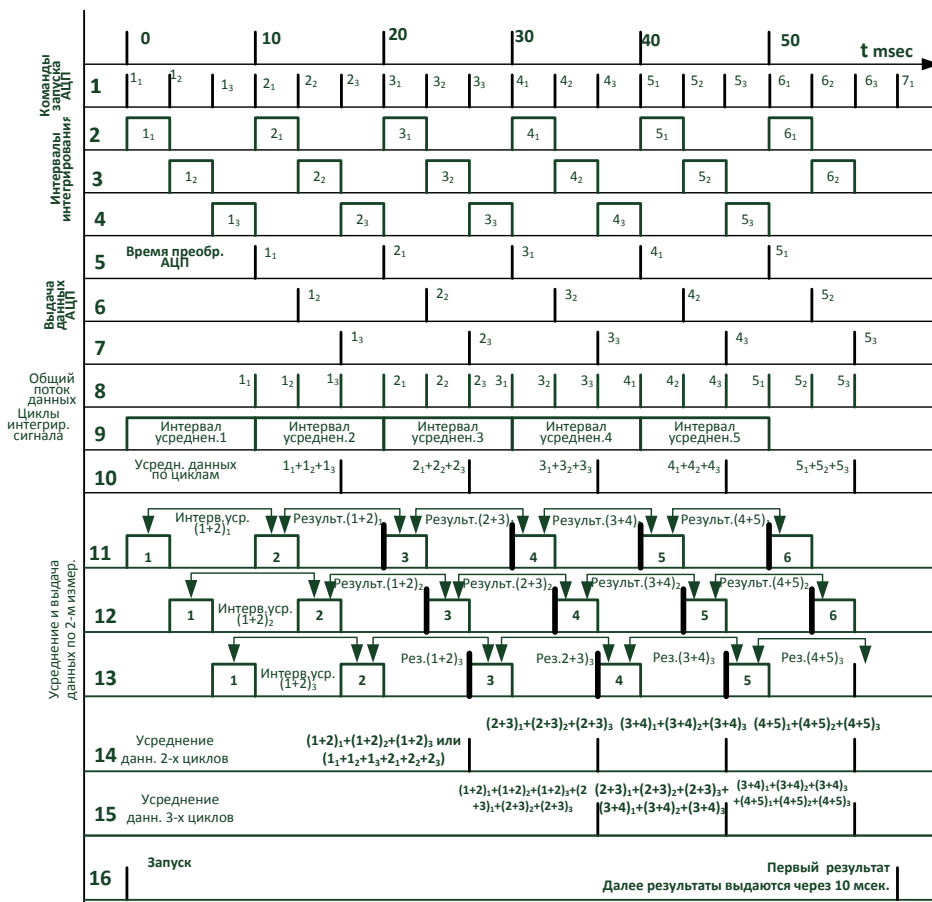


Рисунок 2. Временные диаграммы функционирования многоканальной измерительной системы с уменьшенной асинхронностью преобразований сигналов и подавлением сетевых помех.

300 Гц. Ширина шумовой полосы пропускания при этом составляет 150 Гц.

Для максимально глубокого подавления сетевой помехи интервал между смежными интегрированиями должен быть точно равен половине периода напряжения в сети. Этого можно достичь соответствующим выбором частоты тактирования АЦП и моментов выдачи команд выполнения циклов измерения с учетом алгоритма работы АЦП.

Результаты усреднения пар смежных отсчетов каждого из трех АЦП могут дополнительно усредняться за 2 цикла преобразований (график 9) и выдаваться с частотой около 100 Гц (график 14). То же самое получается, если усреднять данные трех АЦП в двух смежных циклах. Общее время интегрирования сигнала составляет при этом 20 мсек при полосе пропускания канала 50 Гц. Можно усреднять данные и большего числа циклов (график 15) с той же скоростью выдачи данных и сужением шумовой полосы для повышения чувствительности, однако время задержки выдачи данных при этом возрастает. На графике 17 отмечены моменты запуска измерений и получения первого результата с усреднением данных шести циклов преобразований в каждом АЦП. Частота выдачи данных при этом составляет 100 отсчетов/сек, а полоса пропускания канала 17 Гц, поэтому следует учитывать, что при скачкообразном изменении сигнала новый уровень данных преобразования установится на шестом отсчете.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ. С использованием образца-прототипа нового унифицированного базового модуля МХР-4, созданного на основе ранее использовавшегося модуля МХР-3 [7], были проведены экспериментальные исследования разработанного алгоритма работы измерительного канала. На рис. 3 представлены результаты измерения смоделированного полезного сигнала (частота 4,5 Гц, амплитуда 120 мкВ) при воздействии смоделированной помехи (частота 50 Гц, амплитуда 800 мкВ) в режиме попарного усреднения результатов 2-х смежных интегрирований сигнала. В этих экспериментах

тактирование АЦП происходило с частотой 196,6 кГц, при которой АЦП производит 96 отсчетов в секунду, т.е. на 4% меньше их оптимального числа для подавления 50-герцовой помехи, а также с частотой 205,4 кГц, близкой к оптимальной. Это позволяет оценить глубину подавления помехи при отклонениях частоты сети от номинального значения. В связи с этим обстоятельством, при получении осциллограммы помехи получаются биения из-за не кратности частот отсчетов с частотой сети.

На рис. 3а показана осциллограмма сигнала при отсутствии сетевой помехи, на рис. 3б – осциллограмма смеси сигнала и помехи без подавления последней, на которую наложена осциллограмма результатов измерения с попарным усреднением смежных отсчетов АЦП, а на рис. 3в – осциллограммы помехи без подавления и с подавлением (без сигнала). На рис. 3г, д представлены результаты таких же измерений при частоте отсчетов АЦП, близкой к оптимальной (100,5 отс./сек). При этом остаточный уровень помехи (из-за искажений напряжения сети) снижается практически до уровня внутренних шумов измерительного канала (рис. 3е).

На рис. 3ж, з представлены осциллограммы данных, полученных при отсутствии смоделированных сигнала и помехи. Вариации отсчетов связаны с внутренними шумами элементов схемы и иными внешними и внутрисхемными помехами. На рис. 3ж на осциллограмму данных, полученных в одном из каналов без усреднения отсчетов, наложена осциллограмма с усреднением пар смежных отсчетов (подавление 50-герцовой помехи), в результате чего уменьшились высокочастотные составляющие вариаций отсчетов. Во втором случае амплитуда вариаций не превышает ± 4 ед. дискретности (8 мкВ). На рис. 3з показана осциллограмма данных, получаемых от одного сенсора с параллельным попарным усреднением отсчетов в трех каналах (график 14 на рис. 2). Амплитуда вариаций в этом случае не превышает ± 2 ед. дискретности (4 мкВ). На графиках масштаб единицы по горизонтальной оси – 0,01 сек., по вертикальной – 2 мкВ. Эк-

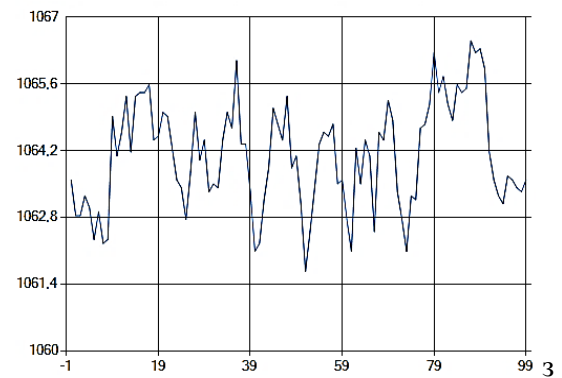
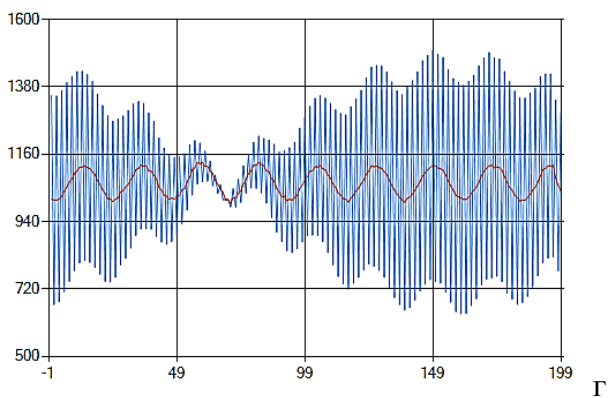
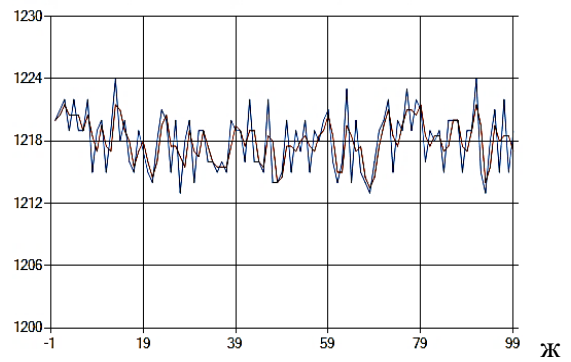
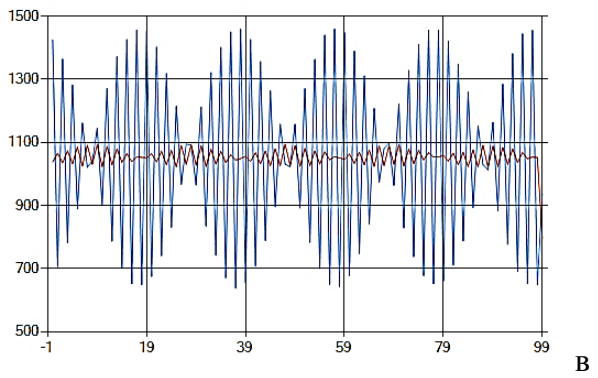
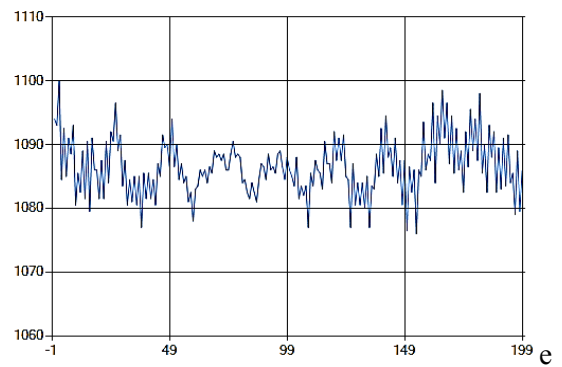
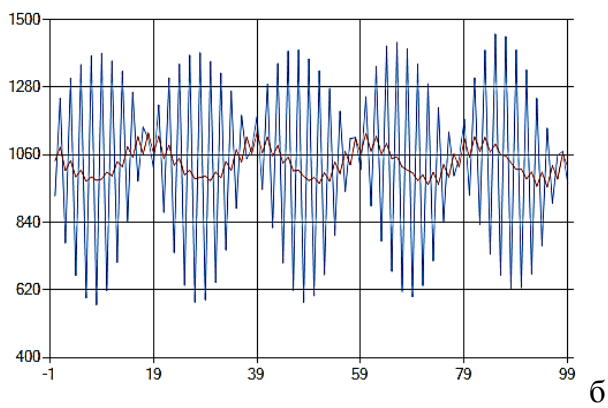
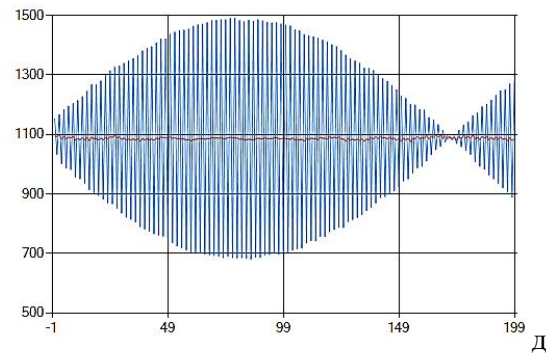
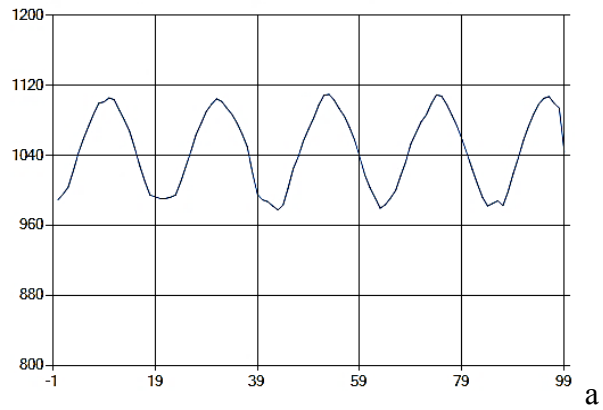


Рисунок 3. Осциллограммы результатов измерения полезного сигнала при воздействии сетевой помехи в режиме попарного усреднения результатов смежных отсчетов.

вивалентная дискретность преобразования канала во всем его динамическом диапазоне ($\pm 0,5$ В) в таком режиме измерения достигает 21 двоичного разряда, а время получения результата после скачкообразного изменения сигнала равно 20 мсек .

ВЫВОДЫ. Рассмотренные методы параллельно-последовательного преобразования и обработки сигналов сенсоров позволяют существенно повысить быстродействие высокочувствительных многоканальных сенсорных измерительных систем, уменьшить их динамические погрешности из-за асинхронности получения данных в разных каналах и при этом сохранить высокую разрешающую способность, хорошее подавление сетевых и других промышленных помех.

Разработанная структура измерительно-го блока с параллельно-последовательным преобразованием сигналов позволяет реализовать предложенные методы измерений и примерно на порядок повысить информационную производительность унифицированного базового импедансометрического модуля без его значительного усложнения.

Список использованной литературы

- [1]. О. В. Klimova. Metodologija dekompozicii dannyh i edinoe opisaniye posledovatel'nyh i parallel'nyh algoritmov vychisleniya operacij obrabotki signalov. Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Upravlenie, vychislitel'naya tehnika i informatika. – 2013. – №2(23). – S. 112 – 120.
- [2] О. Н. P'janchenko. Parallel'no-posledovatel'nye shemy raspredelennyh sistem sbora i obrabotki informacii datchikov. Izvestija JuFU. Tehnicheskie nauki. – 2014. – №4(153). – S. 8 – 14.
- [3] P. Il'in. Parallel'no-posledovatel'nye preobrazovateli SN65HV588x s cifrovym vhomom dlja industrial'nogo primeneniya. Novosti jelektroniki. 2009. – №3. – Stat'ja 3. Rezhim dostupa: <https://www.compel.ru/lib/ne/2009/3/3-parallelno-posledovatelnyie-preobrazovateli-sn65hvs88x-s-tsifrovym-vhomom-dlya-industrialnogo-primeneniya>.
- [4] V. G. Mel'nik, A. D. Vasilenko, A. V. Slickij, S. V. Dzhadevich Mul'tibiosensornaja konduktometrisheskaja sistema s avtomaticheskoy nastrojkoj i samodiagnostikoj. Sensor Electronics and Microsystem Technologies. – 2015. – Т. 12, №4. – S. 49 – 61.
- [5]. Ja. I. Ljepikh, Ju. O. Gordijenko, S. V. Dzhadevych, A. O. Druzhyinin, A. A. Jevtuh, S. V. Ljenkov, V. G. Mel'nyk, V. O. Romanov, V. O. Procenko. Intelektual'ni vymirjuval'ni systemy na osnovi mikroelektronnyh datchykov novogo pokolinnja. za red. Ja. I. Ljepiha, V.O. Romanova. – Odesa: Astroprint, 2011. - 353 s.
- [6]. V. G. Mel'nik, A. V. Slickij, V. D. Pogrebnyak. Issledovanie trebovanij k vyboru taktovyh chastot v mnogochastotnyh vysokotochnyh izmeriteljah kompleksnyh soprotivlenij. 5-ja NTK «Radiotekhnika v XXI stoletii». – 2011. – S. 136-138.
- [7]. S. V. Ljenkov, Ja. I. Lepikh, V. G. Mel'nyk, V. O. Romanov, V. O. Procenko. Intelektual'ni vymirjuval'ni kanaly sensoryh system. Nauka y oborona. – 2011. – №2. – С. 36 – 43.

Стаття надійшла до редакції 05.09.2018 р.

UDC 621.317

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150520>

OPTIMIZATION OF THE STRUCTURE AND ALGORITHM OF THE WORK OF THE HIGHLY-SENSITIVE MULTI-SENSORS SYSTEM WITH IMPEDANCE TRANSDUCERS

V. G. Melnyk, P. I. Borshchev, A. D. Vasylenko, A. V. Slitskiy

Institute of Electrodynamics of NAS of Ukraine, Peremohy Av. 56, Kyiv-57, 03057, Ukraine,
tel. + 38-044-366-25-11, E-mail: melnik@ied.org.ua

Summary

The paper considers the new method of parallel-sequential conversion of weak informative signals for multi-parameter studies of fast processes. Its essence consists in using for the simultaneous transformation of the sensor signals of several integrating ADCs, the number of which corresponds to the ratio of the integration interval and the ADC conversion cycle. Their starts are performed alternately, after the integration is completed in the previous ADC, therefore the data output at the end of their conversion cycles occurs at intervals equal to the integration time of the signals. These data can be combined into a common stream with a correspondingly higher sampling rate. With the ADC conversion cycle time of 10 msec, averaging the results of two adjacent cycles provides interference suppression at the frequency of 50 Hz. Sharing of the integration results of several ADCs during the conversion cycle of one ADC allows to increase the signal averaging interval up to the ADC conversion cycle time. The structure and algorithm of functioning of the unified three-sensors measuring unit based on the AC bridge circuits and high-sensitivity “multi-slope” ADCs of the MAX-132 are developed at the Institute of Electrodynamics of the National Academy of Sciences of Ukraine. The device allows to obtain 18-bit results on three channels with a sampling frequency of 100 Hz, when the readings of the measured quantities are asynchronous is not worse than ± 3.3 msec, while providing high sensitivity and suppression of interference with a frequency of 50 Hz. The results of its testing showed that the random error with respect to input signals of the ADC is approximately ± 5 μ V in the range ± 0.5 V. This measuring unit can be used in single-channel mode for one sensor with a threefold increase in the sampling frequency or with a corresponding reduction in the random error.

Keywords: multichannel sensor system, sensitivity, speed of measuring, noise immunity, integrating ADC.

УДК 621.317

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2018.4.150520>

ОПТИМІЗАЦІЯ СТРУКТУРИ ТА АЛГОРИТМУ РОБОТИ ВИСОКОЧУТЛИВОЇ МУЛЬТИСЕНСОРНОЇ СИСТЕМИ З ІМПЕДАНСНИМИ ДАТЧИКАМИ

В. Г. Мельник, П. І. Борщов, О. Д. Василенко, О. В. Сліцький

Інститут електродинаміки НАН України пр. Перемоги 56, м. Київ-57, 03057, Україна,
тел. + 38-044-366-25-11, E-mail: melnik@ied.org.ua

Реферат

В роботі розглядається новий спосіб паралельно-послідовного перетворення слабких інформативних сигналів при багатопараметрових дослідженнях швидкоплинних процесів. Його суть полягає у використанні для одночасного перетворення сигналів сенсорів декількох інтегруючих АЦП, число яких відповідає кратності інтервалу інтегрування та циклу перетворення АЦП. Їх запуски виконуються по черзі, після закінчення інтегрування в попередньому АЦП, тому видача даних по закінченню їх циклів перетворення відбувається з інтервалами, що дорівнюють часу інтегрування сигналів. Ці дані можуть бути об'єднані в загальний потік з відповідно більш високою частотою вибірок або використовуватись окремо в декількох каналах. При тривалості циклу перетворення АЦП 10 мсек усереднення результатів двох суміжних циклів забезпечує придушення завад з частотою 50 Гц. Спільне використання результатів інтегрування декількома АЦП за час циклу перетворення одного АЦП дозволяє збільшити інтервал усереднення сигналу до тривалості циклу перетворення АЦП. Розглянуто розроблені в Інституті електродинаміки НАН України структуру и алгоритм роботи уніфікованого трьохсенсорного вимірювального блоку на основі мостових кіл змінного струму и високочутливих “multi-slope” АЦП типу MAX-132. Пристрій дозволяє отримати 18-бітові результати по трьох каналах з частотою вибірок 100 Гц при асинхронності відліків вимірюваних величина не гірше $\pm 3,3$ мсек, забезпечуючи при цьому високу чутливість та придушення завад з частотою 50 Гц. Результати його тестування показали, що випадкова похибка по вхідним сигналам АЦП становить приблизно ± 5 мкВ в діапазоні $\pm 0,5$ В. Даний вимірювальний блок може використовуватись в одноканальному режимі для одного сенсора з триразовим підвищенням частоти відліків або з відповідним зменшенням випадкової похибки за рахунок усереднення пар суміжних відліків по всім трьом АЦП.

Ключові слова: багатоканальна сенсорна система, чутливість, швидкодія, завадостійкість, інтегруючий АЦП

**РЕКОМЕНДАЦІЇ
Міжнародної конференції з
інформаційно-телекомунікаційних
технологій та радіоелектроніки
(УкрМіКо'2018/UkrMiCo'2018)**

В Україні з 11 по 14 вересня 2018 р. на базі Одеської національної академії зв'язку імені О.С. Попова відбулася Третя IEEE Міжнародна конференція з інформаційно-телекомунікаційних технологій та радіоелектроніки (УкрМіКо'2018/UkrMiCo'2018).

Організаторами конференції були IEEE Ukraine Section (Київ), IEEE Kharkiv SP/AP/C/EMC/COM Societies Joint Chapter, IEEE Kyiv ED/MTT/CPMT/SSCS/COM Societies Joint Chapter, Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Одеська національна академія зв'язку імені О.С. Попова за участі Міністерства освіти і науки України, Національної академії наук України, провідних університетів України та інноваційних партнерів.

У своєму вступному слові науковий керівник конференції академік НАН України М. Ю. Ільченко розповів про роботу керівного комітету щодо організації конференції, про її загальні показники та тенденції, представив нових керівників секцій конференції, охарактеризував тенденції сучасного розвитку інформаційно-телекомунікаційних технологій щодо реалізації передбачень академіка В. М. Глушкова, здійснення яких стає базисом розвитку цифрової економіки та інформаційного суспільства.

Під час відкриття конференції до учасників звернувся заступник голови IEEE Kharkiv SP/AP/C/EMC/COM Societies Joint Chapter д-р техн. наук В.В. Павліков. Привітання від заступника Міністра освіти та науки України Максима Віталійовича Стріхи зачитав старійшина конференцій під егідою IEEE професор КПІ ім. Ігоря Сікорського д-р фіз.-мат. наук Ю. М. Поплавко, а від імені голови Одеської обласної державної адміністрації Максима Володимировича Степанова побажання успіхів учасникам конференції зачитав проректор із наукової роботи ОНАЗ ім. О. С. Попова канд. техн. наук В. А. Каптур.

На пленарному і чотирьох секційних засіданнях було заслухано 117 доповідей, які висвітлили досягнення 27 університетів і наукових установ України, наукових та освітніх закладів Великобританії, В'єтнаму, Італії, Латвії, США та інших країн.

Високий рівень міжнародної науково-технічної конференції задали автори доповідей, з якими учасники ознайомилися під час пленарного засідання. Найбільший інтерес та увагу слухачі проявили до доповідей відомих науковців, зокрема «Introduction into the General Theory of Infocommunications» (П. Воробієнко, ОНАЗ ім. О.С. Попова), «Intrusion Detection of Traffic Realizations Based on Matching Learning using Fractal Properties» (Д. Агеєв, Т. Радвілова, Л. Кириченко, В. Булах, ХНУ-РЕ), «Frequency Estimation of Signals by ESPRIT Method using SSA-based Preprocessing» (В. Василішин, ХНАУ), «Magnetoresistance of GaP0.4As0.6 Whiskers at Low Temperatures» (А. Дружинін, Л. Островський, Ю. Ховенко, Н. Лях-Кагуй, НУ «Львівська Політехніка»), «On Weakly Damped EM Energy Transport along Linear Ag Nano-Waveguides through L-corners and T-junctions» (А. Чепок, ОНАЗ ім. О.С. Попова) та інших.

Серед доповідей, виголошених на секціях конференції, було чимало оригінальних досліджень, що відповідають актуальним напрямкам наукового пошуку. Зокрема, учасники Секції № 1 «Інфокомунікації» відзначили наукову та практичну значущість доповіді авторів С. Вишневого, О. Лящука, С. Жука (КПІ ім. Ігоря Сікорського) «Two-stage Filtration of Digital Images with Regions of Constant Intensity in the Presence of Additive Uncorrelated Noise», у якій розглянуто підходи щодо побудови двостадійної фільтрації зображень, яка складається з масивів відомих констант інтенсивностей і пошкоджених додаткових незв'язаних шумових зразків. Значний інтерес науковців викликала доповідь авторів О. Москаленко та В. Москаленка (Сумський державний університет) «Growing Convolutional Neural Network for Malware Traffic Detection», у якій розглянуто модель, що базується на нейронній мережі зі згорткою для виявлення характеристик та

поточної класифікації трафіку з метою детектування шкідливого трафіку на основі нових методів навчання мережі, які визначають правила прийняття рішень.

У Секції № 2 «Телекомунікації» викликала значну зацікавленість доповідь Т. Шмельової (ОНАЗ ім. О. С. Попова) «Communication Device in d-Dimensional Square Grid», у якій наведено аналіз властивостей моделі ідеального телекомунікаційного протоколу двома класами мереж Петрі із зазначенням їх переваг та недоліків. Запропоновано використання розфарбованих мереж Петрі для побудови та аналізу простору станів моделі та застосування нескінченних мереж Петрі для аналізу властивостей моделей методами лінійної алгебри. Увагу учасників Секції № 2 привернула також доповідь авторів Л. Уривського, А. Мошинської, С. Осипчука, А. Пешкіна (КПІ ім. Ігоря Сікорського) «The Comparative Assessment of Corrective Parameters for Antinoise Convolutional and Block Codes», у якій обґрунтовано методику порівняння характеристик згорткових і блокових завадостійких кодів через зведення параметрів згорткових кодів до еквівалентних параметрів блокових кодів. Показано, що згорткові коди доцільно використовувати тільки в разі наявності окремих помилок у каналі і коли важливим фактором є простота реалізації кодера, в той час як блокові коди мають кращі корегувальні властивості та складніші алгоритми кодування/декодування.

Серед доповідей, виголошених на секції № 3 «Радіотехніка», слід відзначити доповідь авторів О. Лисенка, Ю. Волка, О. Рибалки (Сумський державний університет) «Non-linear Theory of Multiharmonic Two-Stream Superheterodyne FELs with Helical Electron Beams», присвячену вдосконаленню техніки лазерів на вільних електронах. Також схвальні відгуки учасників секції отримала робота авторів А. Литвиненко, С. Тьюковса, Д. Пікулінса, А. Аболтінса (Ризький технічний університет) «The Impact of Waveform on the Efficiency of Wireless Power Transfer Using Prefabricated Energy Harvesting Device», присвячена дослідженню впливу форми сигналу

на ефективність систем безпроводового збирання енергії (Energy Harvesting).

Під час роботи Секції № 4 «Електроніка» значний інтерес викликала доповідь авторів М. Ільченка, О. Живкова, А. Зазеріна (КПІ ім. Ігоря Сікорського) «Metamaterial Cells Equivalent Circuit, Degenerated Oscillation and Electromagnetically Induced Transparency», у якій досліджені властивості метаматеріалів із використанням моделі, що дає змогу аналізувати характеристики метаматеріалів та передбачати можливості їх ефективного використання. Цікавою була також доповідь авторів І. Ковтуна, С. Петрашук, Ю. Бойко (Хмельницький НУ) «Stress Estimation for Encapsulated Electronic Packages Subjected to Thermal Impacts», у якій наведені результати експериментальних досліджень надійності електронних приладів під тепловим навантаженням, що дуже важливо враховувати при організації їх виробництва.

За рішенням секцій визначені найкращі доповіді, виголошені молодими вченими – учасниками Конференції, а саме:

- Секція № 1 «Інфокомунікації» визнала найкращою доповідь Бешлея Максима Івановича (НУ «Львівська політехніка», к.т.н., старшого викладача кафедри телекомунікацій), народження 18.07.1990 року;
- Секція № 2 «Телекомунікації» визнала найкращою доповідь Невзорової Олени Сергіївни (ХНУРЕ, асистента кафедри інфокомунікаційної інженерії), народження 26.05.1992 року;
- Секція № 3 «Радіотехніка» визнала найкращою доповідь Остроумова Івана Вікторовича (НАУ, к.т.н., доцента кафедри аеронавігаційних систем), народження 03.07.1983 року;
- Секція № 4 «Електроніка» визнала найкращою доповідь Шамардіна Артема Володимировича (СумДУ, аспіранта кафедри електроніки та комп'ютерної техніки), народження 26.07.1992 року.

Проведена **конференція зберегла та закрила свої особливості.**

По-перше, відповідно до Меморандуму між організаторами конференції та керівни-

ми органами IEEE конференція **УкрМіКо** підтвердила статус зареєстрованої в системі конференцій IEEE, тому має можливість розмістити матеріали відібраних доповідей в електронному ресурсі IEEE Xplore Digital Library, який індексується наукометричними базами даних (Scopus, Web of Science, Google Scholar та ін.).

По-друге, за організацією та підсумками проведення конференція підтвердила статус базової конференції Наукової ради Міністерства освіти і науки України, що, зокрема, спрямована на розгляд доповідей, які віддзеркалюють зміст держбюджетної наукової тематики університетів України.

До Керівного комітету конференції увійшли 8 членів Секції № 5 «Електроніка, радіотехніка та телекомунікації» Наукової ради МОН України.

16 із 24 членів цієї секції є авторами та співавторами доповідей на конференції, які відповідають тематиці держбюджетних НДР.

По-третє, оцінку наукового рівня робіт здійснювали члени Секції № 5 та інших секцій Наукової ради міністерства, які ввійшли до складу Програмного комітету та були учасниками пленарних і секційних засідань конференції.

До складу Програмного комітету ввійшли представники 17 національних університетів, 6 наукових, зокрема академічних, установ України, 24 іноземних наукових центрів, зокрема Варшавської політехніки (Польща), Дрезденського технічного університету (Німеччина), Ризького технічного університету (Латвія) та інших.

Усього бажання взяти участь у конференції виявили автори 181 доповідь, із яких 97 % – англомовні.

Загалом свої доповіді надіслали представники 40 установ, серед яких – 27 ЗВО і наукових установ України, 13 наукових установ та університетів з Великобританії, В'єтнаму, Італії, Іраку, Пакистану, Південної Кореї, США та інших країн.

Найбільшу кількість доповідей надіслали КПІ ім. Ігоря Сікорського (28 доповідей), ХНУ ім. В.Н. Каразіна (21 доповідь), НУ «Львівська політехніка» (21 доповідь).

До Програми конференції після рецензування було включено 136 доповідей, розподілених за 4 напрямками.

Значна частина доповідей науковців з університетів відповідають тематиці держбюджетних НДР (а саме 70 зі 117 виголошених, тобто 60%).

98 доповідей (54% від поданих) пройшли відбір і рекомендовані до розміщення в електронному ресурсі IEEE Xplore Digital Library.

По-четверте, у конференції взяли участь та підтримали її представники профільних підприємств та інноваційно орієнтованих інформаційно-телекомунікаційних компаній, що має сприяти поглибленню співпраці університетів і наукових установ із промисловістю та бізнесом.

Зокрема, серед партнерів-організаторів конференції – компанії Nokia Ukraine, Lifecell. ТОВ «Телекарт-Прилад» як підприємство-співорганізатор вирішило питання фінансового заохочення авторів кращих доповідей – молодих учених.

На підставі розгляду виголошених доповідей, пропозицій Програмного комітету, його співголів за напрямками роботи конференції, головуєчих на засіданнях секцій **конференція рекомендує**:

1. Вважати Третю **IEEE Міжнародну конференцію з інформаційно-телекомунікаційних технологій та радіоелектроніки (УкрМіКо'2018)** такою, що відбулася як базова конференція Наукової ради Міністерства освіти і науки України за напрямом «Електроніка, радіотехніка та телекомунікації», яка спрямована, зокрема, на розгляд доповідей, що віддзеркалюють зміст держбюджетної наукової тематики ЗВО України.

2. Відзначити вагомий внесок в організацію конференції та в процедуру залучення конференції в структуру IEEE Українського відділення IEEE, а також регіональних представників (IEEE Kharkiv SP/AP/C/EMC/COM Societies Joint Chapter, IEEE Kyiv ED/MTT/CPMT/SSCS/COM Societies Joint Chapter).

3. Відзначити, що значна кількість доповідей відповідає змісту держбюджетної наукової тематики ЗВО України за напрама-

ми роботи Секції № 5 «Електроніка, радіотехніка та телекомунікації» Наукової ради МОН України; врахувати визначені в них результати при проведенні наукової експертизи на етапах завершення та рекомендацій до відкриття нових НДР.

4. Організаційному комітету конференції підготувати пропозиції щодо вдосконалення практики та методики перевірки доповідей за ознакою оригінальності.

5. Звернутися до Міністерства науки та освіти України з пропозицією доповнити освітні програми закладів середньої освіти за напрямом «Інформатика» тематичними матеріалами, які висвітлюють значний внесок у розвиток сучасних інформаційних технологій вітчизняних учених, зокрема академіка В.М. Глушкова (відп. М.Ю. Ільченко).

6. Наведені в додатку А доповіді, які висвітлюють нові, раніше не опубліковані результати наукових досліджень, рекомендувати для розміщення в електронному ресурсі IEEE Xplore Digital Library.

Термін подання матеріалів для розміщення (відп. Л.С. Глоба) – до 10.10.2018 р.

7. Рекомендувати наведені в додатку В доповіді, які виголошені на конференції та рекомендовані відповідними секціями, для розміщення у вітчизняних фахових наукових виданнях, зокрема в міжнародних журналах «Information & Telecommunication Sciences» (КПІ ім. Ігоря Сікорського), «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології» (ОНУ ім. І.І. Мечникова), «Телекомунікації та радіоелектроніка» (НУ «Львівська політехніка») та інших виданнях.

Термін подання матеріалів до редакцій – до 10.10.2018 р.

8. Продовжити практику **нагородження молодих учених** – учасників конференції за кращі доповіді на наступних конференціях **УкрМіКо**.

9. Доповіді, включені до Програми конференції, розмістити в **Збірнику матеріалів** Міжнародної конференції з інформаційно-телекомунікаційних технологій та радіоелектроніки (УкрМіКо'2018/UkrMiCo'2018) за узгодженням з керівництвом IEEE і після публікації рекомендованих матеріалів конфе-

ренції в електронному ресурсі IEEE Xplore Digital Library (відп. Л.О. Уривський).

10. Рекомендувати Секції № 5 «Електроніка, радіотехніка та телекомунікації» Наукової ради МОН України розглянути підсумки роботи конференції УкрМіКо'2018 на своєму черговому засіданні.

11. Рекомендувати спеціалізованим вченим радам ЗВО, які працюють у галузі знань 17 «Електроніка та телекомунікації», вважати доцільною підтримку участі здобувачів наукового ступеня доктора філософії в роботі науково-технічних конференцій під егідою IEEE, зокрема в міжнародній конференції УкрМіКо.

Звернутися до МОН України з пропозицією доповнити «Тимчасовий Порядок присудження науково-освітнього ступеня доктора філософії» вимогою вважати заліковими публікаціями матеріали здобувачів на міжнародних конференціях, які індексовані в міжнародних наукометричних базах Scopus, Web of Science та ін. (відп. М.Ю. Ільченко).

12. Інформацію про результати проведення конференції, посилання на публікації та збірник матеріалів розмістити на сайті конференції УкрМіКо'2018 до 20.09.2018 р. (відп. Г.Д. Созоник).

Проінформувати всіх авторів, які надіслали доповіді на конференцію УкрМіКо'2018, про підсумки конференції та запросити їх до участі в конференції **УкрМіКо'2019**.

Запропонувати редакціям провідних спеціалізованих видань IEEE та України розмістити матеріали про результати проведення конференції.

Запропонувати редакціям цих видань розмістити також інформацію про терміни та умови організації конференції **УкрМіКо'2019**.

13. Звернутися до всіх учасників конференції та їхніх колег із пропозицією взяти більш активну участь у роботі міжнародної організації IEEE та її українських підрозділів, зокрема на підставі сплачуваного членства в IEEE.

14. Активізувати запрошення до участі в конференції **УкрМіКо** провідних закордонних учених, що працюють в університетах і

наукових установах багатьох країн світу, зокрема представників української діаспори.

15. Відзначити подякою всіх членів Керівного, Організаційного, Програмного та Виконавчого комітетів як організаторів конференції. Окремо подякувати ректору Одеської національної академії зв'язку ім. О.С. Попова проф. П.П. Воробієнку та представникам академії за значні й успішні зусилля щодо організації прийому учасників конференції та проведення пленарних і секційних засідань.

16. Організацію та проведення наступної **Міжнародної конференції з інформаційно-телекомунікаційних технологій та радіоелектроніки (УкрМіКо'2019/**

УкрМіСо'2019) у період з 10 по 13 вересня 2019 року доручити діючому Керівному комітету.

Рекомендувати Керівному комітету вдосконалити склад Програмного комітету відповідно до вимог IEEE та з урахуванням досвіду організації УкрМіКо'2018.

17. Місцем проведення наступної конференції **УкрМіКо'2019** визначити Одеську національну академію зв'язку О.С. Попова відповідно до побажань учасників конференції.

Рекомендації схвалено на Пленарному засіданні конференції **УкрМіКо'2018** 14.09.2018 р.

Додаток А

Доповіді,

виголошені на Третій IEEE Міжнародній конференції з інформаційно-телекомунікаційних технологій та радіоелектроніки
(УкрМіКо'2018/UkrMiCo'2018)

та рекомендовані відповідними секціями для розміщення
в електронному ресурсі IEEE Xplore Digital Library.

ЕС#	ЕС #	Authors	Title
1	181	Vorobiyenko P.	Introduction into the General Theory of Infocommunications
2	95	Radivilova T., Kirichenko L., Bulakh V., Ageyev D.	Intrusion Detection of Traffic Realizations Based on Maching Learning using Fractal Properties
3	166	Rolik O., Zharikov E., Yasochka M., Butenko M.	The Method of Impact Analysis for Access Networks with RIP and OSPF Protocols
4	158	Kuznetsov A., Shekhanin K., Kolhatin A., Kavun S.	Steganography hiding of information in the file system structure
5	154	Klymash M., Demydov I., Beshley M., Kostiv O.	Structures Assessment of Data-Centers' Telecommunication Systems for Metadata Fixation
6	116	Vasylyshyn V.	Frequency Estimation of Signals by ESPRIT Method using SSA – based Preprocessing
7	67	Pavlikov V., Huu Nguyen Van, Zhyla S., Dobryak V.	UWB Aperture Synthesis: Investigation of Spatio-Spectral Sensitivity Domain
8	29	Tatarchuk D., Didenko Yu., Borisov A., Poplavko Yu.	Planar composite structures for microwave devices electromechanical control
9	65	Klymov O., Kurbatov D., Frolov A.	Chemical composition and some structural properties of Zn(1-x)Mn(x)S semiconductor films obtained by close-spaced vacuum sublimation
10	18	Druzhinin A., Ostrovskii I., Khoverko Y., Liakh-Kaguy N.	Magnetoresistance of GaP0.4As0.6 whiskers at low temperatures
11	23	Chepok A.	On weakly damped EM energy transport along linear Ag nano-waveguides through L-corners and T-junctions
Section 1: INFOCOMMUNICATIONS			
12	137	Baliar V., Petrik Yu.	Resource allocation for delivery of MPEG video content via IP based systems
13	6	Avramenko V.	Operative recognition of the form of the numerical functions

14	177	Kaidan M., Andrushchak V., Stryhalyuk B., Dumych S.	Intelligent Data Flow Management Based on Optical Label Switching Technology for Photonic Transport Network
15	139	Globa L., Moroz A.	Big Data processing for telecom operator system
16	117	Nakonechniy O., Lysenko V., Koval V., Kalian D.	Infocommunication Technologies for Multichannel Monitoring of Synchronization Signals and Energy Efficiency Control of SMART- and Mikro-Grid Electrical System
17	42	Vyshnevyi S., Liashuk O., Zhuk S.	Two-stage filtration of digital images with regions of constant intensity in the presence of additive uncorrelated noise
18	16	Mazurkiewicz O., Lopashchenko I.	Estimation of face detection accuracy of Viola-Jones algorithm in video applications
19	176	Panchenko O., Beshley M., Kyryk M., Beshley H.	Investigation and Implementation of Methods for Controlling the Intensity of Flow of Information Protocols
20	178	Maksymyuk T., Luntovskyy A., Gazda Ju., Klymash M.	Artificial Intelligence based 5G Coverage Design and Optimization using Deep Generative Adversarial Neural Networks
21	92	Stephanovich O., Kuznetsova K., Tarasenko Yu., Polins'ky O.	Steganography hiding of information using 3D printing technologies (№92)
22	57	Moskalenko A., Moskalenko V.	Growing Convolutional Neural Network For Malware Traffic Detection
23	150	Akolzina O., Gorbenko I., Kachko E.	Research of post-quantum public key encryption algorithm
24	175	Beshley M., Toliupa S., Pashkevych V., Kolodiy R.	Development of Software System for Network Traffic Analysis and Intrusion Detection
25	77	Korchynskii V., Kildishev V., Golev D.	Increase of transmission security based on timer signal construction
26	53	Penkin Yu., Khara G., Kucherenko V., Lytvynov O.	Software and hardware protection of control channels in unsecure medium
Section 2: TELECOMMUNICATIONS			
27	15	Oreshkov V., Balashov V., Barba I., Iegupova O.	Compensation of Crosstalk in the Parallel Operation of G.Fast Systems over TPP Type Multi-Bundle Telephone Cables
28	73	Staschuk O., Stepanov D., Bahachuk D.	Determining the Length of the Amplifying Section Limited by Four-Wave Mixing for the Non-Zero Dispersion-Shifted Fiber
29	127	Romanov O., Nesterenko M., Veres L.	Integration of Modern Protocols IP-Telephony In IMS Architecture
30	103	Shmeleva T.	Communication Device in d-dimensional square Grid
31	39	Kychak V., Vasylykivskiy M., Huz M., Kychak V.	Pulse-code modulator for processing of weakly intense signals in the terahertz frequency range

32	9	Vasytkivsky M., Bortnyk G., Kychak V.	Correction method of clock signals jitter in telecommunication systems
33	88	Nikityuk L., Tsaryov R., Lavreka K., Shulakova K.	Method of Optimum Synthesis of Reconstructed Broadband Subscriber Access Network
34	143	Avdeyenko G.	Prototype of unidirectional microwave wireless communication system with spatial signals processing
35	124	Horbatiy I., Ki4selychnyk M.	Investigation of the Efficiency of Methods for Forming and Processing of Signals in Wireless Communication Systems
36	171	Uryvsky L., Yakornov E., Tsukanov O.	Method for determining the coordinates of sensors in wireless sensor networks
37	36	Boyun V.	Principles of Constructing a Neural Network for the Selection and Primary Processing of Information with Elements of the Human Visual Analyzer
38	64	Fediushyna D., Romanov O., Tho Dong	Model and Method of Li-Fi Network Calculation with Multipath Light Signals
39	96	Lemeshko O., Yeremenko O., Persikov A., Vavenko T.	Mathematical Model of Calculating the Maximum Number of Disjoint Paths in Secure Routing
40	106	Lebedenko T., Kholodkova A., Aymen Al-Dulaimi	Linear-Quadratic Model of Optimal Queue Management on Interface of Telecommunication Network Router
41	120	Osypchuk S., Uryvsky L., Moshynska A., Pieshkin A.	The Comparative Assessment of Corrective Parameters for Antinoise Convolutional and Block Codes
42	159	Kuznetsov A., Kolovanova Ie., Panchenko V., Florov S.	Analysis and Investigation of Properties of Algebraic Geometric Codes
43	149	Miskiv V.-M., Prudyus I., Yankevych R.	Code Binary Sequences Optimization Based on Their Algebraic Representation
44	180	Strelkovskaya I., Solovskaya I., Makoganiuk A.	Predicting characteristics of self-similar traffic
45	108	Lemeshko O., Yevdokymenko M, Yeremenko O., Ahmad Hailan	Tensor QoE-based Routing Model with Evaluation of the Quality Rating
46	111	Ilyashenko A., Kovalenko T., Nevzorova O., Ali Salem Ali	Diaoptic Method of Inter-Area Routing in the Telecommunication Network
47	113	Khodniev T., Varfolomieiev A., Lysenko O., Antonyuk O.	Comparison of RTSP and GigE Vision Video Streaming Technologies in Terms of Communication Path Utilization Efficiency: an Experimental Approach
48	169	Klymash Yu., Shpur O., Strykhaliuk B.	Investigating Ant Colony Optimization Algorithm for Increasing Routing Efficiency in Self-Organized Networks

49	2	Lozhkovskiy A., Levenberg Ye.	Calculation of Waiting Probability in the Single-channel System with Self-similar Network Traffic
50	179	Narytnik T., Rassamakin B. Prisyazhny V., Kapshtyk S.	Coverage Aarea Formation for a Low-Orbit Broadband Access System with Distributed Satellites
Section 3: RADIO ENGINEERING			
51	44	Lysenko A., Volk Yu., Rybalko O.	Nonlinear Theory of Multiharmonic Two-Stream Superheterodyne FELs with Helical Electron Beams
52	128	Rassokhina Yu., Chernov D., Colantonio P.	High-Efficiency Microwave Power Amplifier on Basis of Defected Ground Structure Resonators
53	121	Komarov V., Barybin O., Rassokhina Yu., Krizhanovski V.	Dumbbell-Shaped Defected Ground Structure Resonator Filter for High-Efficiency Microwave Power Amplifiers
54	79	Chernov A., Kazmirenko V., Prokopenko Yu., Vandenbosch Guy A. E.	Micromechanical Tuning of CPW-Based Resonator
55	13	Yushchenko A.	A Method for Intelligent Synthesis of Bandpass Filters and Its Electrodynamic Basis
56	47	Degtyarev A., Dubinin M., Maslov V., Muntean K.	Spatial-energy characteristics of focused modes of metallic terahertz laser resonator
57	27	Penkin Yu., Katrich V., Nesterenko M., Dumin O.	Estimation of Surface Impedances for Thin Metallic Films by a Waveguide Method
58	46	Lepikh Ya., Karpenko A.	Method of Decrease in Level of the Return Radiation of the Aperture Antennas Electromagnetic Waves
59	54	Zinher Ya., Adamenko Yu., Adamenko V., Nelin E.	Fifth-Order Lowpass Filters on Electromagnetic-Crystal Inhomogeneities
60	94	Yeliseyeva N., Berdник Katrych V., Nesterenko M.	Directional and Polarization Patterns of Impedance Monopole Placed on Square Metal Screen
61	52	Mayboroda D., Pogarsky S., Gazaryan R.	Microstrip Monopole Antenna with Complicated Topology of Slot Discontinuities
62	109	Vovchuk D., Khobzei M., Zhadan I.	Properties of Antennas Modified by Wire Media
63	131	Filins'kyy L., Bukharov S., Tsypko L., Galych M.	Dual Vivaldi Antenna for Telecommunications
64	19	Goriushkina A., Zavolodko A., Svyd I., Maistrenko H.	Comparative Analysis of Signal Processing Methods Secondary Surveillance Radar
65	21	Svyd I., Zavolodko A., Maltsev A., Goriushkina A.	Impact of Fluctuation Interferences to the Responders Performance of Secondary Surveillance Radar System
66	40	Zhuk S., Tovkach I.	Adaptive Filtration of Radio Source

			Movement Parameters Based on the RSS-Measurement Sensor Networks in the Presence of Anomalous Measurements
67	55	Emelyanov L., Miroshnikov A., Domnin I., Rogozhkin E.	Features of Signals Reception and Processing at the Kharkiv Incoherent Scatter Radar
68	60	Lishchenko V., Kalimulin T., Khizhnyak I., Khudov H.	The Method of the Organization Coordinated Work for Air Surveillance in MIMO Radar
69	97	Ostroumov I., Kuzmenko N.	Performance Analysis of Passive Positioning by Distance Measuring Equipment and Automatic Dependent Surveillance Broadcast Data
70	98	Kuzmenko N., Ostroumov I.	Aircraft location detection by Airborne Collision and Avoidance System data
71	151	Hryvachevskiy A., Fabirovskyy S., Prudyus I.	Evaluation of image informativeness in multispectral monitoring systems with image fusion
72	81	Polikarovskiykh O., Gula I., Kovtun L., Karpova L.	Direct digital frequency synthesizer with a combined method of synthesis output harmonic signal
73	104	Zinher Ya., Adamenko Yu., Adamenko V., Nelin E.	Delta Models of Frequency-Selective Structures
74	91	Semenov A., Savytskyi A., Semenova O., Kychak V.	Frequency Divider Based on a Transistor Structure with Negative Resistance and an I-V curve of Λ -type
75	118	Pidchenko S., Taranchuk A., Spivak A.	Providing Technical Invariance of Crystal Oscillators Based on Autonomising Dual-Loop PLL System
76	138	Makarov D., Kryzhanovskiy V., Krizhanovski V., Grebennikov A.	Experimental Investigation of Class E Power Amplifier with Shunt Filter for Reduced Duty Ratio
77	170	Litvinenko A., Tjukovs S., Pikulins D., Aboltins A.	The Impact of Waveform on the Efficiency of Wireless Power Transfer Using Prefabricated Energy Harvesting Device
Section 4: ELECTRONICS			
78	5	Melnyk I., Piasetska N.	Iterative Algorithm for Estimation of Plasma Boundary Position in High Voltage Glow Discharge Electrodes Systems with Spherical Cathode, Conic Anode and Plane Additional Electrode
79	76	Osadchuk A., Zhahlovska E. Koval D.	Liquidometer with a Frequency Output on the Basis of Capacity Sensor
80	85	Zhylenko T., Gaponova O.	Statistical analysis of aluminized coatings obtained by electrosark deposition
81	28	Poplavko Yu., Didenko Yu.	Spontaneous Polarization or Manifestation of Peculiar Internal Structure

82	10	Tsizh B., Aksimentyeva O.	Ways to Improve the Sensitivity and Selectivity of Gas Sensors Based on Polyaniline
83	147	Sugak D., Yaknevykh U., Buryy O.,	The Experimental Investigations and Modeling of Copper Ions Diffusion into LiNbO ₃ Crystal
84	135	Huzenko O., Dobrozhan O., Kurbatov D., Opanasyuk A.	Ag, ZnO, Cu ₂ ZnSnS ₄ nanoinks for printed electronics
85	26	Ilchenko M., Zhivkov A., Zazerin A.	Metamaterial Cells Equivalent Circuit, Degenerated Oscillation and Electromagnetically Induced Transparency
86	134	Karbovnyk I., Chalyy D., Lukashevych D., Klym H.	Electrical Properties at Low Temperatures of PEDOT-based nanocomposites
87	133	Klym H., Shpotyuk O., Hadzaman I., Karbovnyk I.	Microstructure of modified Cu _{0.4} Ni _{0.4} Co _{0.4} Mn _{1.8} O ₄ Ceramics for Temperature Sensor Electronics
88	110	Vasiljev A., Kozonushchenko O., Vasiliev T.	The Resistivity of Thin Layer Formed in Si by Proton Beam Irradiation
89	84	Petrovska H., Yaremchuk I., Malynych S., Bobitski Ya.	Optimization of Recording Technology of the Surface Relief Diffraction Gratings on Base of GaAs
90	45	Fitio V., Bendzyak A.j, Yaremchuk I., Bobitski Ya.	Properties of Metal/Dielectric/Metal and Dielectric/Metal/Dielectric Nanowaveguide Structures
91	123	Botsman I., Nevliudova V.	Research of Mechanical Influences on Flexible Printed Circuits Parameters
92	115	Nevliudov I., Gurina D., Garyachevskaya I.	Methods of preparation real image for quality control of manufacturing flexible structure
93	114	Voliansky R., Sadovoi A., Sokhina Yu., Volianska N.	Stability Analysis of Micro-Electrostatic Actuator's dynamic
94	153	Afanassyev D., Ubizskii S., Zhydachevskii Y., Rabyk V.	Photon Counting with Synchronous Background Subtraction for Time Resolved Optically Stimulated Luminescence Readout
95	152	Ubizskii S., Afanassyev D., Zhydachevskii Y., Lucheckho A. Rabyk V.	Set-up for Pulsed OSL Readout of YAP:Mn Dosimetric Detectors
96	43	Baida I., Kulikov K., Timofeyev V.	Regarding the Influence of Short-wavelength Phonons on Intervalley Scattering
97	83	Gordienko Yu., Levchenko A., Shcherban I.	Physical decoding of multivarious images in SMM
98	102	Kovtun I., Petrashchuk S., Boiko Ju.	Stress estimation for encapsulated electronic packages subjected to thermal impacts

Доповіді,

виголошені на Третій IEEE Міжнародній конференції з інформаційно-телекомунікаційних технологій та радіоелектроніки
(UkrMiKo'2018/UkrMiCo'2018)

та рекомендовані відповідними секціями для розміщення
у вітчизняних фахових наукових виданнях.

ЕС#	ЕС #	Authors	Title
1	82	Volokyta A., Duc Thinh Vu, Rehida P.	The Programming Language for Embedded Devices
2	100	Smirnov A., Kuznetsova T., Mikheev I.	Complex Discrete Signals in Steganography
3	161	Kiyan A., Belozertsev I., Revak I., Malenko E.	Code-based schemes of formation and verification of the digital signature
4	37	Gnatyuk S., Iavich M., Zhmurko T., Yubuzova Kh.	Deterministic quantum cryptography protocol model for depolarized quantum channel
5	140	Ponomar V., Yesina M., Gorbenko Yu.	Comparative analysis of key encapsulation mechanisms
6	167	Nariezhnii O., Kokhanovska T., Krivich M., Florov S.	Side channel attack on the extractor of a quantum random number generator
7	63	Globa L., Kurdecha V., Shoferivskiy A.	Comparison of Three-Tier Architecture with Two-Tier
8	142	Bunin S., Avdeyenko G., Narytnik T.	UWB Reception and Transmission Based on Antenna Decoding
9	80	Romaniuk V., Stepanenko E., Zhuk A., Romaniuk A.	Method of collecting monitoring information in wireless sensor networks with UAV
10	58	Gurin O., Legenkiy M., Ryabykh V., Seniuta V.	Selective Properties of Azimuthal-Symmetric Diffraction Mirrors of a Terahertz Laser
11	14	Kaliberda M., Pogarsky S., Roiuk M., Lytvynenko L.	Diffraction by Double Layer Graphene Strip Grating
12	145	Piza D., Romanenko S., Moroz G., Semenov D.	Estimation of losses in jammers compensation at the classification-training sample formation by the frequency method (№145)
13	56	Shapovalov Yu., Bachyk D., Chaban K., Shapovalov I.	The D-Trees Method and its Application to the Analysis of Linear Periodically-Time-Variable Circuits by the Frequency Symbolic Method
14	70	Druzhinin A., Khooverko Yu., Nichkalo S., Kogut I., Holota V.	Technological Micromachining of Silicon Wafer for Fabrication of Micro/Nano Structures

15	78	Shamardin A., Kurbatov D., Hovorun T., Medvids A.	Some structural and optical properties of CZTGeS thin films obtained at different substrates temperature
16	112	Hreb V., Vasylechko L.	High temperature structural behaviour of potential multifunctional material $\text{SmCo}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$
17	87	Pavlovska O., Vasylechko L.	Solid Solutions $\text{La}_{1-x}\text{R}_x\text{FeO}_3$ (R = Pr, Nd, Gd) – Perspective Electronic Materials
18	17	Politanskyi R., Politanskyi L.	Modeling of bit error in the system of magnetic operative memory based on the transport properties of polarized spin current
19	42	Bezruk V., Ivanenko S.	Methods for the Detection and Recognition of Signals in Conditions of a Priori Uncertainty

ІНФОРМАЦІЯ ДЛЯ АВТОРІВ. ВИМОГИ ДО ОФОРМЛЕННЯ СТАТЕЙ У ЖУРНАЛ

Журнал «Сенсорна електроніка і мікросистемні технології» публікує статті, короткі повідомлення, листи до Редакції, а також коментарі, що містять результати фундаментальних і прикладних досліджень, за наступними напрямками:

1. Фізичні, хімічні та інші явища, на основі яких можуть бути створені сенсори
2. Проектування і математичне моделювання сенсорів
3. Сенсори фізичних величин
4. Оптичні, оптоелектронні і радіаційні сенсори
5. Акустoeлектронні сенсори
6. Хімічні сенсори
7. Біосенсори
8. Наносенсори (фізика, матеріали, технологія)
9. Матеріали для сенсорів
10. Технологія виробництва сенсорів
11. Сенсори та інформаційні системи
12. Мікросистемні та нанотехнології (MST, LIGA-технологія та ін.)
13. Деградація, метрологія і сертифікація сенсорів

Журнал публікує також замовлені огляди з актуальних питань, що відповідають його тематиці, поточну інформацію – хроніку, персоналії, платні рекламні повідомлення, оголошення щодо конференцій.

Основний текст статті повинен відповідати вимогам Постанови Президії ВАК України від 15.01.2003 р. №7-05/1 (Бюлетень ВАК України 1, 2003 р.) і бути структурованим. Матеріали, що надсилаються до Редакції, повинні бути написані з максимальною ясністю і чіткістю викладу тексту. У поданому рукописі повинна бути обґрунтована актуальність розв'язуваної задачі, сформульована мета дослідження, міститися оригінальна частина і висновки, що забезпечують розуміння суті отриманих результатів і їх новизну. Автори повинні уникати необґрунтованого введення нових термінів і вузькопрофільних жаргон-

них висловів.

Редакція журналу просить авторів при направленні статей до друку керуватися наступними правилами:

1. Рукописи повинні надсилатися у двох примірниках українською, або російською, або англійською мовою і супроводжуватися файлами тексту і малюнків на CD. Рукописи, які пропонуються авторами з України або країн СНД до видання англійською мовою обов'язково доповнюються україномовною або російськомовною версією. Електронна копія може бути надіслана електронною поштою.

2. Прийнятні формати тексту: MS Word (rtf, doc).

3. Прийнятні графічні формати для рисунків: EPS, TIFF, BMP, PCX, WMF, MS Word і MS Graf, JPEG. Рисунки створені за допомогою програмного забезпечення для математичних і статистичних обчислень, повинні бути перетворені до одного з цих форматів.

4. На статті авторів з України мають бути експертні висновки про можливість відкритого друку.

Рукописи надсилати за адресою:

Лепіх Ярослав Ілліч, Заст. гол. редактора, Одеський національний університет імені І. І. Мечникова, МННФТЦ (НДЛ-3), вул. Дворянська, 2, Одеса, 65082, Україна.

Телефон / факс +38(048) 723-34-61,

E-mail: semst-journal@onu.edu.ua,

http://semst.onu.edu.ua

Здійснюється анонімне рецензування рукописів статей.

Правила підготовки рукопису:

Рукописи повинні супроводжуватися офіційним листом, підписаним керівником установи, де була виконана робота. Це правило не стосується робіт представлених авторами із закордону чи міжнародними групами авторів.

Авторське право переходить Видавцю.

Титульний аркуш:

1. PACS і Універсальний Десятковий Код Класифікації (УДК) (для авторів із країн СНД) – у верхньому лівому куті. Допускається декілька відділених комами кодів. Якщо ніякі коди класифікації не позначені, код(и) буде(-уть) визначено Редакційною Колегією.

2. Назва роботи (по центру, прописними літерами, шрифт 14pt, жирно).

3. Прізвище (-а) автора(-ів) (по центру, шрифт 12pt).

4. Назва установи, повна адреса, телефони і факси, e-mail для кожного автора, нижче, через один інтервал, окремим рядком (по центру, шрифт 12pt).

5. Анотація: до 1000 символів.

6. Ключові слова: їхня кількість не повинна перевищувати восьми слів. В особливих випадках можна використовувати терміни з двома — чи трьома словами. Ці слова повинні бути розміщені під анотацією і написані тією самою мовою.

П.п. 2,3,4,5,6 послідовно викласти українською, англійською і російською мовами.

Для авторів з закордону, які не володіють українською або російською мовами, пп. 2-5 викладаються англійською мовою.

7. До кожного примірника статті додаються реферати українською / російською (в залежності від мови оригіналу статті), та англійською мовами (кожен реферат на окремому аркуші). Особливу увагу слід приділяти написанню резюме статті англійською мовою. Для цього доцільно користуватися послугами кваліфікованих спеціалістів-лінгвістів з подальшим науковим редагуванням тексту автором(-ами). Перед словом «реферат» необхідно написати повну назву статті відповідною мовою, УДК, прізвища та ініціали авторів, назви установ. Реферат обсягом 200-250 слів має бути структурованим: мета

(чітко сформульована), методи дослідження, результати дослідження (стисло), узагальнення або висновки. Після тексту реферату з абзацу розміщуються ключові слова.

8. Текст статті повинен бути надрукований через 1,5 інтервали, на білому папері формату А4. Поля: зліва - 3см, справа - 1,5см, вверху і знизу - 2,5см. Шрифт 12pt. Підзаголовки, якщо вони є, повинні бути надруковані прописними літерами, жирно.

Рівняння повинні бути введені, використовуючи MS Equation Editor або MathType. Роботи з рукописними вставками не приймаються. Таблиці повинні бути представлені на окремих аркушах у форматі відповідних текстових форматів (див. вище), чи у форматі тексту (з колонками, відділеними інтервалами, комами, крапкам з комою, чи знаками табулювання).

9. У кінці тексту статті указати прізвища, імена та по батькові усіх авторів, поштову адресу, телефон, факс, e-mail (для кореспонденції).

10. Список літератури повинен бути надрукований через 1,5 інтервали, з літературою, пронумерованою в порядку її появи в тексті. Бібліографія друкується лише латиницею (кирилиця подається в транслітерації). Порядок оформлення літератури повинен відповідати вимогам ВАК України, наприклад:

[1]. I.M. Cidilkov skii. *Elektrony i dyrki v poluprovodnikah*. Nauka, M. 450 s. (1972).

[2]. J.A. Hall. *Imaging tubes*. Chap. 14 in *The Infrared Handbook*, Eds. W.W. Wolfe, G.J. Zissis, pp. 132-176, ERIM, Ann Arbor, MI (1978).

[3]. N. Blutzer, A.S. Jensen. *Current readout of infrared detectors* // *Opt. Eng.*, 26(3), pp. 241-248 (1987).

11. Підписи до рисунків і таблиць повинні бути надруковані в рукописі з двома пробілами після списку літератури. Виносок, якщо можливо, бажано уникати.

Приймаються тільки високоякісні рисунки. Написи і символи повинні бути надруковані усередині рисунку. Негативи, слайди, і діапозитиви не приймаються.

Кожен рисунок повинен бути надрукова-

ний на окремому аркуші і мати розмір, що не перевищує 160x200 мм. Для тексту на рисунках використовуйте шрифт 10pt. Одиниці виміру повинні бути позначені після коми (не в круглих дужках). Усі рисунки повинні бути пронумеровані в порядку їх появи в тексті, з частинами позначеними як (а), (б), і т.д. Розміщення номерів рисунків і напису усередині малюнків не дозволяються. Зі зворотної сторони, напишіть олівцем назву, прізвище(а) автора(-ів), номер малюнка і позначте верх стрілкою.

Фотографії повинні бути оригінальними. Кольоровий друк можливий, якщо його вартість сплачується авторами чи їх спонсорами.

12. Стаття має бути підписана автором (усіма авторами) з зазначенням дати на останній сторінці.

Автори несуть повну відповідальність за бездоганне мовне оформлення тексту, особливо за правильну наукову термінологію (її слід звіряти за фаховими термінологічними словниками).

13. Датою надходження статті вважається день, коли до редколегії надійшов остаточний варіант статті після рецензування.

Після одержання коректури статті автор повинен виправити лише помилки (чітко, синьою або чорною ручкою неправильно закреслити, а поряд з цим на полі написати правильний варіант) і терміново відіслати статтю на адресу редколегії електронною поштою.

Підпис автора у кінці статті означає, що автор передає права на видання своєї статті редакції. Автор гарантує, що стаття оригінальна; ні стаття, ні рисунки до неї не були опубліковані в інших виданнях.

Відхилені статті не повертаються.

INFORMATION FOR AUTHORS

THE REQUIREMENTS ON PAPERS PREPARATION

Journal «Sensor Electronics and Microsystems Technologies» publishes articles, brief messages, letters to Editors, and comments containing results of fundamental and applied researches, on the following directions:

1. Physical, chemical and other phenomena, as the bases of sensors
2. Sensors design and mathematical modeling
3. Physical sensors
4. Optical, optoelectronic and radiation sensors
5. Acoustoelectronic sensors
6. Chemical sensors
7. Biosensors
8. Nanosensors (physics, materials, technology)
9. Sensor materials
10. Sensors production technologies
11. Sensors and information systems
12. Microsystems and nano-technologies (MST, LIGA-technologies et al.)
13. Sensor's degradation, metrology and certification

The journal publishes the custom-made reviews on actual questions appropriate to the mentioned subjects, current information – chronicle, special papers devoted to known scientists, paid advertising messages, conferences announcements.

The basic article text should meet the SAC Ukraine Presidium Decree requirements from 15.01.2003 № 7-05/1 (SAC Bulletin № 1, 2003) and be structured. The materials sent to Editors, should be written with the maximal text presentation clearness and accuracy. In the submitted manuscript the actuality of problem should be reflected, the purpose of the work should be formulated. It must contain an original part

and conclusions providing the received results essence and their novelty understanding. The authors should avoid the new terms and narrow-profile jargon phrase unreasonable introduction.

Journal Edition asks authors at a direction of articles in a print to be guided by the following rules:

1. Manuscripts should be submitted in duplicate in Ukrainian, English, or Russian, a hard copy and supplemented with a text file and figures on a CD. Manuscripts which are offered by authors from Ukraine or CIS countries to the edition in English are necessarily supplemented by Ukrainian or Russian version. An electronic copy may be submitted by e-mail.

2. Acceptable text formats: MS Word (rtf, doc).

3. Acceptable graphic formats for figures: EPS, TIFF, BMP, PCX, CDR, WMF, MS Word and MS Graf, JPEG. Figures created using software for mathematical and statistical calculations should be converted to one of these formats.

4. For articles of authors from Ukraine there should be expert conclusions about an opportunity of an open print.

Manuscripts should be sent to:

Lepikh Yaroslav Illich, The Vice Editor, Odessa National I. I. Mechnikov University, ISEPTC (RL-3), str. Dvoryanskaya, 2, Odessa, 65082, Ukraine.

Phone/fax +38(048) 723-34-61,

E-mail: semst-journal@onu.edu.ua,

http://semst.onu.edu.ua

Manuscripts of articles anonymous reviewing is carried out

The manuscript preparation rules:

The manuscripts should be supplemented with the Official letter signed by a chief manager of the institution where the work was performed. This rule does not apply to papers submitted by authors from abroad or international groups of authors.

Copyright transfer to the Publisher.

Title Page:

1. PACS and Universal Decimal Classification code (for authors from CIS) in the top left corner. Several comma-separated codes are allowed. If no classification codes are indicated, the code(s) will be assigned by the Editorial Board.

2. Title of the paper (central, capital, bold, 14pt).

3. Name (-s) of the author(-s) below, in one space (central, normal face, 12pt).

4. Name of affiliated institution, full address, phone and fax numbers, e-mail addresses (if available) for each author below, in one space (central, normal face, 12pt).

5. Abstract: up to 1000 characters.

6. Keywords: its amount must not exceed eight words. In the specific cases it is acceptable to use two- or three-word terms. These words must be placed under the abstract and written in the same language.

Items 2,3,4,5,6 must be presented in series in Ukrainian, English and Russian languages.

For authors from abroad which do not know Ukrainian or Russian languages, items 2-5 may be presented only in English.

7. To each copy of the article abstracts in Ukrainian / Russian (depending on language of the original all authors of article), and the English language are applied (each abstract on a separate sheet). The special attention should be given to the writing of the article summary in English. For this purpose it is expedient to use the qualified experts - linguists with the further scientific editing the text by the author (-s). Before the word "abstract" it is necessary to write the full article name by the appropriate language, UDC, surnames and the initials of the authors, names of affiliated institutions. The abstract in volume of 200-250 words must be

structured: the purpose (precisely formulated), research methods and results (shortly), generalizations or conclusions. After the text of the abstract from the item key words are placed.

8. Article text should be printed 1,5-spaced on white paper A4 format with a 12pt, margins: left – 3sm, right – 1,5, upper and lower – 2,5sm. Titles of the sections if it is present should be typed bold, capitals.

Equations should be entered using MS Equation Editor or MathType. Papers with handwritten equations are not accepted. Notations should be defined when the first appearing in the text.

Tables should be submitted on separate pages in the format of appropriate text formats (see above), or in the text format (with columns separated by interval, commas, or tabulation characters).

9. At the article text end one must indicate surnames, names and patronymics of all authors, the mail address, the phone, a fax, e-mail (for the correspondence).

10. List of references should be 1,5-spaced, with references numbered in order of their appearance in the text. The bibliography is printed only by the roman type (cyrillics represents in transliteration).

The literature registration order should conform to DAS of Ukraine requirements, for example:

[1]. I.M. Cidilkov skii. *Elektrony i dyrki v poluprovodnikah*. Nauka, M. 450 s. (1972).

[2]. J.A. Hall. *Imaging tubes*. Chap. 14 in *The Infrared Handbook*, Eds. W.W. Wolfe, G.J. Zissis, pp. 132-176, ERIM, Ann Arbor, MI (1978).

[3]. N. Blutzer, A.S. Jensen. *Current readout of infrared detectors // Opt. Eng.*, 26(3), pp. 241-248 (1987).

11. Figures and tables captions should be printed in the manuscript double-spaced after the list of references. Footnotes should be avoided if possible.

Only high-quality pictures can be accepted. Inscriptions and symbols should be printed inside picture. Negatives, and slides are not accepted.

Each figure should be printed on a separate page and have a size not exceeding 160x200 mm. For text inside figures, use 10pt. Measurement units should be indicated after a comma (not in blankets). All figures are to be numbered in order of its appearance in the text, with sections denoted as (a), (b), etc. Placing the figure numbers and captions inside figures is not allowed. On the backside, write with a pencil the paper title, author(s) name(s) and figure number, and mark the topside with an arrow.

Photographs should be submitted as original prints. Color printing is possible if its cost is covered by the authors or their sponsors.

12. The article must be signed by author (all authors) with the date indication on the last page.

Authors bear full responsibility for irreproachable language make out of the text, es-

pecially for a correct scientific terminology (it should be verified under terminological dictionaries of the appropriate speciality).

13. The date of article acceptance is that one when the final variant comes to the publisher after a prepublication review.

After obtaining the proof sheet the author should correct mistakes (clearly cancel incorrect variant with blue or black ink and put the correct variant on border) and send urgently the revised variant to the editor by e-mail.

Author's signature at the article end vouches that author grants a copyright to the publisher. Author vouches that the work has not been published elsewhere, either completely, or in part and has not been submitted to another journal.

Not accepted manuscripts will not be returned.

Комп'ютерне верстання – О. І. Карлічук

Підп. до друку 17.12.2018. Формат 60×84/8.
Ум.-друк. арк. 15,11. Тираж 300 пр. Зам. № 1861.

Видавець і виготовлювач
Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4215 від 22.11.2011 р.

Україна, 65082, м. Одеса, вул. Єлісаветинська, 12
Тел.: (048) 723 28 39